

Министерство образования и науки Российской Федерации
Удмуртский государственный университет

Е. В. Харанжевский, М. Д. Кривилёв

**ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ, ЛАЗЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
И МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ВЕЩЕСТВО**

Учебное пособие по курсу
“Физика лазеров и лазерные технологии”



Ижевск
2011

Харанжевский Е. В., Кривилёв М. Д. Физика лазеров, лазерные технологии и методы математического моделирования лазерного воздействия на вещество. Учебное пособие. Под общей редакцией П. К. Галенко. Ижевск: Изд-во “Удмуртский университет”, 2011. 187 с.

Учебно-методическое пособие по курсу “Физика лазеров и лазерные технологии” содержит опорный конспект лекций, читаемых для студентов по специальности “Физика” и магистрантов специальности “Химия, физика и механика материалов” (направление материаловедение), вопросы для самоконтроля и информацию к выполнению лабораторного практикума по лазерной обработке материалов и компьютерному моделированию процессов, происходящих в зоне лазерного воздействия на вещество, с применением пакета инженерно-физических вычислений Comsol Multiphysics. Конспект лекций посвящен описанию физических основ лазерных оптических генераторов, процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом, областей применения лазерных технологий и методов прогнозирования качества лазерной обработки, основанных на математическом моделировании процессов, происходящих в зоне лазерного воздействия.

Оглавление

1	ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ЛАЗЕРОВ	11
1.1	Спонтанное излучение	11
1.2	Поглощение фотона	13
1.3	Вынужденное (индуцированное) излучение	14
1.4	Принцип работы лазера	16
1.5	Схемы накачки	19
1.6	Свойства лазерного излучения	22
1.6.1	Монохроматичность	22
1.6.2	Когерентность	23
1.7	Режимы генерации лазерного излучения	24
1.7.1	Непрерывный режим	24
1.7.2	Режим модуляции добротности	24
1.8	Типы лазеров	27
1.8.1	Твердотельные лазеры	27
1.8.2	Оптоволоконные лазеры	32
1.8.3	Полупроводниковые лазеры	35
1.8.4	Газовые лазеры	39
1.8.5	Химические лазеры	43
1.8.6	Лазеры на центрах окраски	44
1.8.7	Лазеры на красителях (жидкостные лазеры)	47
1.8.8	Экимерные лазеры	49
1.8.9	Лазеры на свободных электронах	53
1.8.10	Рентгеновские лазеры	54

1.9	Воздействие лазерного излучения на вещество	57
1.9.1	Взаимодействие излучения с непрозрачными тверды- ми телами	57
1.9.2	Скин-слой и оптические свойства металлов	59
1.9.3	Плавление и испарение металлов	63
2	ЛАЗЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	70
2.1	Технологии лазерной обработки металлов	71
2.1.1	Структурные изменения и фазовые превращения железоуглеродистых сплавов в процессе лазерного упрочнения	77
2.1.2	Механические свойства сплавов $Fe - C$ после лазер- ного упрочнения	85
2.1.3	Область применения и практика внедрения лазерного упрочнения сталей	91
2.2	Селективное лазерное спекание порошков	92
2.2.1	Метод лазерного спекания порошков	92
2.2.2	Особенности метода лазерного высокоскоростного спекания	97
3	РАСЧЕТ ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУР В ПОРОШКОВОМ СЛОЕ	100
3.1	Численное моделирование фазовых переходов в пакете Comsol MultiPhysics	101
3.2	Расчет тепловых полей при лазерной обработке сплошных и пористых сред	111
3.2.1	Физико-математическая модель теплопереноса в по- ристых системах	111
3.2.2	Принципы построения компьютерной модели	117
3.2.3	Параметры управления лазерным спеканием	119

3.2.4	Анализ градиентов температуры и скоростей охлаждения в зоне лазерного воздействия	121
3.3	Лабораторные работы по расчету лазерной обработки	126
3.4	Вопросы для самоконтроля по материалу главы	137
4	МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ (в соавторстве с Д.А. Даниловым)	139
4.1	Локально—неравновесная модель затвердевания	142
4.2	Влияние скорости лазерной обработки на кристаллическую микроструктуру	152
4.3	Анализ морфологической устойчивости фронта кристаллизации	157
4.4	Прогнозирование характеристик кристаллической микроструктуры	167
4.5	Вопросы для самоконтроля по материалу главы	173
	Литература	175

Предисловие редактора

Настоящее учебное пособие вводит студентов в основы работы лазеров и дает представление об основах метода моделирования воздействия лазерного излучения на поверхность материалов. Начиная с базовых принципов работы лазеров, систематизированы разнообразные типы лазеров и приведены эффекты, возникающие при взаимодействии лазерного излучения с непрозрачными (в частности, с металлическими) материалами.

Технологии лазерной обработки материалов рассмотрены для двух классических приложений теории и эксперимента: обработки поверхностей металлов и сплавов, а также спекания порошков. Особое внимание уделено структурным и фазовым превращениям на поверхностях железоуглеродистых сплавов и особенностям высокотемпературного спекания при воздействии интенсивного лазерного излучения.

Детально изложены особенности и приведена формулировка математической модели высокоскоростной перекристаллизации. Дан подход к моделированию эволюции микроструктуры материала при воздействии на него высокоинтенсивным лазерным излучением. На примере диаграммы отбора микроструктур (MSM-диаграмма) наглядно показано, что скорость сканирования лазерного луча и условия на границе раздела "материал-окружающая среда" определяют два физически значимых параметра: скорость затвердевания и градиент температуры. Эти параметры управляют эволюцией кристаллической микроструктуры при лазерной перекристаллизации материала.

В заключении учебного курса дана связь процессов лазерного упрочнения и улучшения механических свойств сталей с параметрами моделиро-

вания и экспериментальными данными. Для закрепления материала курса предлагаются лабораторные работы и контрольные вопросы.

Используя методологию физического материаловедения и математического моделирования, предлагаемый учебный курс написан кратко и последовательно. Это делает возможным получить ясное представление об основах физики лазеров, лазерных технологиях и методе моделирования лазерной обработки материалов.

Докт. физ.-мат. наук, профессор П. К. Галенко

От авторов

Создание данного пособия стало возможным благодаря большой поддержке со стороны коллег и учеников в Удмуртском государственном университете. Мы искренне благодарны д.ф.-м.н. П.К. Галенко, д.х.н. С.М. Решетникову, к.ф.-м.н. Д.А. Данилову, к.ф.-м.н. В.Г. Лебедеву за плодотворное обсуждение результатов и совместные исследования. Проведение многочисленных экспериментов стало возможным благодаря помощи к.т.н. А.Г. Ипатова, С.Н. Костенкова, Т. Писаревой. Компьютерное моделирование проводилось при активном участии Г. Гордеева, В. Анкудинова и Д. Афлятуновой. Организационная поддержка декана физико-энергетического факультета В.П. Бовина позволила внедрить учебный курс “Физика лазеров” в программу подготовки магистров. Авторы также выражают благодарность за финансовую поддержку Российскому фонду фундаментальных исследований, грант 09-02-12110 офи-м, и ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России”, проект 2009-1.5-507-007-002.

ВВЕДЕНИЕ

Первые выдающиеся достижения в создании оптических квантовых генераторов¹ — лазеров — открыли новую, невероятно перспективную область технологических решений, широко используемых теперь в науке и технике. Вслед за этими открытиями стало очевидным, что лазеры — гибкий инструмент, имеющий множество применений. И поэтому никого не удивля-

1

- 1916 год: А. Эйнштейн предсказывает существование явления вынужденного излучения — физической основы работы любого лазера. Строгое теоретическое обоснование в рамках квантовой механики это явление получило в работах П. Дирака в 1927–1930 гг.
- 1928 год: экспериментальное подтверждение Р. Ладенбургом и Г. Копферманном существования вынужденного излучения. В 1940 г. В. Фабрикантом и Ф. Бутаевой была предсказана возможность использования вынужденного излучения среды с инверсией населённостей для усиления электромагнитного излучения.
- 1950 год: А. Кастлер (Нобелевская премия по физике 1966 года) предлагает метод оптической накачки среды для создания в ней инверсной населённости. Реализован на практике в 1952 году Бросселем, Кастлером и Винтером. До создания квантового генератора оставался один шаг: ввести в среду положительную обратную связь, то есть поместить эту среду в резонатор.
- 1954 год: первый микроволновой генератор — мазер на аммиаке (Ч. Таунс — Нобелевская премия по физике 1964 года, Дж. Гордон, Г. Цайгер). Роль обратной связи играл объёмный резонатор, размеры которого были порядка 12,6 мм (длина волны, излучаемой при переходе аммиака с возбуждённого колебательного уровня на основной). Весомый вклад в изучение принципов квантового усиления и генерации внесли также советские физики А. Прохоров и Н. Басов (Нобелевская премия по физике 1964 г.). Для усиления электромагнитного излучения оптического диапазона необходимо было создать объёмный резонатор, размеры которого были бы порядка микрона. Из-за связанных с этим технологических трудностей многие учёные в то время считали, что создать генератор видимого излучения невозможно.
- 1960 год: Т. Мейман продемонстрировал работу первого оптического квантового генератора — лазера. В качестве активной среды использовался рубин (оксид алюминия Al_2O_3 с небольшой примесью хрома Cr), а вместо объёмного резонатора был использован открытый оптический резонатор. Этот лазер работал в импульсном режиме на длине волны в 694,3 нм. В декабре того же года был создан гелий-неоновый лазер, излучающий в непрерывном режиме (А. Джаван, У. Беннет, Д. Хэрриот). Изначально лазер работал в инфракрасном диапазоне, затем был модифицирован для излучения видимого красного света [1].

ет последовавшее быстро прогрессирующее развитие как фундаментальной науки, посвященной физическим основам генерации лазерного излучения, так и самой лазерной техники.

Широта современных возможностей лазеров впечатляет. К настоящему времени трудно представить область деятельности человека, в которой не использовались бы лазеры: будь то наука, техника, медицина или сельское хозяйство. Так, например, при производстве сотового телефона, используется более десяти (!!!) различных лазерных технологий.

Широта задач, решаемых с применением лазерных технологий, объясняет большое разнообразие видов лазеров. Конечно, в рамках данного учебного курса невозможно дать исчерпывающе полные сведения обо всех видах лазеров. Энциклопедические знания о лазерах включают несколько томов информации. Известно и большое число научных монографий и статей по физике лазеров. Тем не менее, студент или магистрант, успешно освоивший курс, должен знать фундаментальные положения физики лазеров и взаимодействия лазерного излучения с веществом, основные виды генераторов лазерного излучения, уметь точно выбирать тип лазеров для решения конкретных задач в науке или технике, моделировать результат лазерного воздействия на вещество, иметь представление о современных тенденциях развития лазеров, обладать навыками ремонта и обслуживания лазерной техники.

Физический практикум по курсу выполняется в лабораториях “Лазерные технологии” кафедры общей физики и “Физики конденсированных сред” Учебно-научного института экспериментального естествознания Удмуртского государственного университета.

1. ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ЛАЗЕРОВ

Для генерации лазерного излучения используются три фундаментальных явления, происходящие при взаимодействии электромагнитных волн с веществом, а именно процессы спонтанного и вынужденного излучения света и процесс его поглощения. Подробное описание физических принципов генерации лазерного излучения представлено, например, в работах [2, 3]. Мы ограничимся кратким рассмотрением основ.

1.1. Спонтанное излучение

В основе физического принципа процесса спонтанного излучения света лежит дискретное строение электронных энергетических уровней атомов и молекул. Подробно это явление рассматривается в курсе Атомной физики (см., например, [4]).

Рассмотрим в некоторой среде два энергетических уровня 1 и 2 с энергиями E_1 и E_2 ($E_1 < E_2$). В последующем рассмотрении это могут быть любые два уровня m и n из неограниченного набора уровней, свойственных данной среде. В многоэлектронных атомах или молекулах нижние энергетические уровни являются занятыми, однако, не теряя общности, удобно принять уровень 1 за основной. Предположим, что атом (или молекула) вещества находится первоначально в состоянии, соответствующем уровню 2 (см. рис. 1.1а). Поскольку $E_2 > E_1$, атом будет стремиться перейти к состоянию с наименьшей энергией, то есть на уровень 1 (см. рис. 1.1б). Следовательно, из атома должна выделиться соответствующая разность энергий $E_2 - E_1$. Когда выполняются правила отбора для излучательных переходов,

эта энергия высвобождается в виде электромагнитной волны. В этом случае процесс называют спонтанным излучением. При этом энергия $h\nu$ излученной волны определяется соотношением

$$h\nu = E_2 - E_1, \quad (1.1)$$

где h — постоянная Планка. Таким образом, спонтанное излучение характеризуется испусканием фотона с частотой $\nu = (E_2 - E_1)/h$ при переходе атома с уровня 2 на уровень 1. Заметим, что в случае невыполнения правил отбора переход атома из одного состояния в другое происходит безызлучательным путем. В этом случае избыток энергии $E_2 - E_1$ выделяется в какой-либо иной форме (например, разность энергии может перейти в кинетическую энергию окружающих молекул).

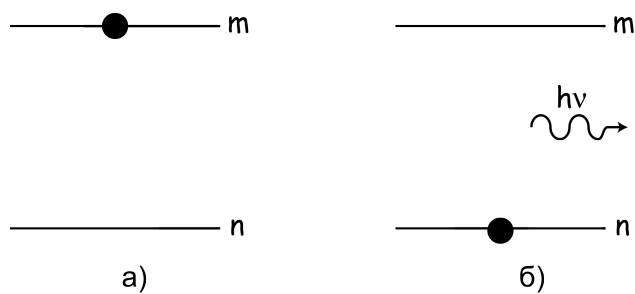


Рис. 1.1. Схематическое изображение состояния атома: а — до испускательного перехода; б — после перехода

Определим вероятность спонтанного излучения фотона. Предположим, что в момент времени t на уровне 2 находятся N_2 атомов в единице объема. Скорость спонтанного излучательного перехода $(dN_2/dt)_S$ этих атомов, очевидно, пропорциональна N_2 . Следовательно, можно написать уравнение для скорости перехода:

$$\left(\frac{dN_2}{dt} \right)_S = -A_{21} N_2. \quad (1.2)$$

Множитель A_{21} представляет собой вероятность спонтанного излучения и называется коэффициентом Эйнштейна (выражение для A_{21} впервые было получено Эйнштейном из термодинамических соображений). Величину

$\tau_s = 1/A_{21}$ называют спонтанным временем жизни. Численное значение величины A_{21} зависит от конкретного перехода, участвующего в излучении.

1.2. Поглощение фотона

Рассмотрим теперь атом, находящийся в состоянии с наименьшей энергией, то есть на уровне 1. Так как это основной уровень, то атом будет оставаться на нем до тех пор, пока на него не подействует какое-либо внешнее возмущение. Пусть на вещество падает электромагнитная волна с частотой ν , определяемой выражением (1.1). Очевидно, что энергия $h\nu$ фотона строго соответствует разности энергий атома в возбужденном (2) и основном (1) состояниях. В таком случае существует конечная вероятность того, что атом перейдет на верхний уровень 2 (см рис. 1.2).

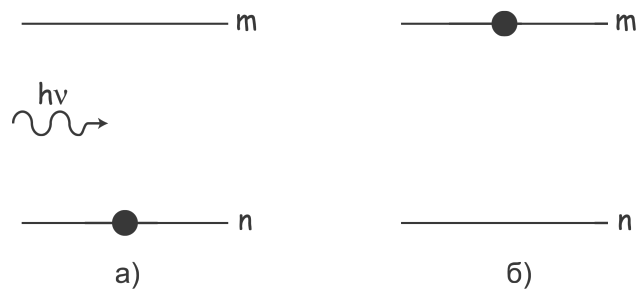


Рис. 1.2. Схематическое изображение перехода атома, сопровождающегося поглощением фотона

Разность энергий $E_2 - E_1$, необходимая для того, чтобы атом совершил переход, берется из энергии падающего фотона, то есть переход сопровождается исчезновением фотона. В этом заключается процесс поглощения. По аналогии с выражением (1.2) вероятность W_{12} поглощения фотона характеризует скорость перехода:

$$\frac{dN_1}{dt} = -W_{12}N_1, \quad (1.3)$$

где N_1 — число атомов в единице объема, которые в данный момент времени находятся на уровне 1. Как и коэффициент A_{21} , определяемый выражени-

ем 1.2, величина W_{12} имеет также размерность с^{-1} . Однако в отличие от A_{21} вероятность W_{12} зависит не только от конкретного перехода, но и от интенсивности падающей электромагнитной волны. Точнее, для плоской волны можно написать

$$W_{12} = B_{12} \frac{I}{h\nu}. \quad (1.4)$$

Здесь I — интенсивность электромагнитной волны, а B_{12} — сечение поглощения — величина, имеющая размерность площади, зависящая от характеристик конкретного перехода.

1.3. Вынужденное (индуцированное) излучение

Предположим снова, что атом первоначально находится на верхнем уровне 2 и на вещество падает электромагнитная волна с частотой ν , определяемой выражением (1.1) (т. е. с частотой, равной частоте спонтанно испущенной волны). Поскольку частоты падающей волны и излучения, связанного с атомным переходом, равны друг другу, имеется конечная вероятность того, что падающая волна вызовет индуцированный переход ($2 \rightarrow 1$) атома с уровня 2 на уровень 1. При этом разность энергий $E_2 - E_1$ выделяется в виде электромагнитной волны, которая добавится к падающей. Это и есть явление вынужденного излучения. Между процессами спонтанного и вынужденного излучения имеется существенное отличие. В случае спонтанного излучения атом испускает электромагнитную волну, фаза которой не имеет определенной связи с фазой волны, излученной другим атомом. Более того, испущенная волна может иметь любое направление распространения. В случае же вынужденного излучения, поскольку процесс инициируется падающей волной, излучение любого атома добавляется к этой волне в той же фазе. Падающая волна определяет также направление распространения испущенной волны. То есть при вынужденном излучении происходит усиление волны (см. рис. 1.3).

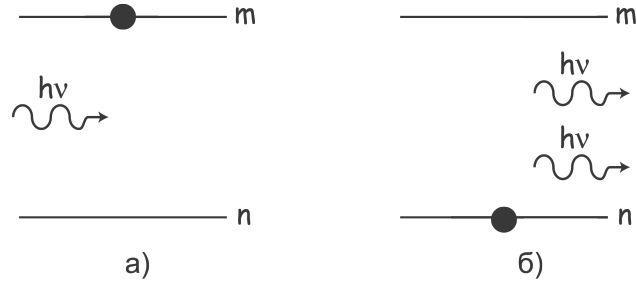


Рис. 1.3. Когерентное излучение фотона (б), индуцированное падающей волной (а)

Определим вероятность вынужденного излучения. Скорость $\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_i$ вынужденного излучения можно описать с помощью уравнения

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_i = -W_{21}N_2, \quad (1.5)$$

где W_{21} — вероятность вынужденного перехода. Как и в случае поглощения фотона вероятность W_{21} зависит от интенсивности падающей электромагнитной волны. Тогда для плоской волны можно написать

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_i = -B_{21} \frac{IN_2}{h\nu}, \quad (1.6)$$

где B_{21} — сечение индуцированного излучения.

Число атомов, находящихся в единице объёма, мы будем в дальнейшем называть населённостью энергетического уровня. Коэффициенты A_{12} , B_{12} , B_{21} , входящие в уравнения (1.2), (1.3), (1.6), соответственно, называются коэффициентами Эйнштейна. Как показал Эйнштейн ещё в начале XX века, между коэффициентами устанавливается связь

$$B_{21} = \frac{g_1}{g_2} B_{12}, \quad (1.7)$$

где g_1 и g_2 — статистический вес (кратность вырождения) уровней с энергиями E_1 и E_2 .

1.4. Принцип работы лазера

Рассмотрим в какой-либо среде два произвольных энергетических уровня 1 и 2 с соответствующими населенностями N_1 и N_2 . Не теряя общности можно предположить, что эти уровни имеют одинаковые кратности вырождений $g_1 = g_2$, тогда $B_{12} = B_{21} = B$. Пусть в этой среде в направлении оси z распространяется плоская волна с интенсивностью I . Тогда в соответствии с выражениями (1.2) – (1.6) приращение интенсивности (то есть плотности потока энергии электромагнитных волн) dI , обусловленное как процессами вынужденного излучения, так и процессами поглощения, в слое dz (заштрихованная область на рис. 1.4) определяется уравнением

$$dI = BI(N_2 - N_1)dz. \quad (1.8)$$

Видно, что если $N_2 > N_1$, то $dI > 0$ – среда усиливающая, если же $N_2 < N_1$, $dI < 0$ – среда поглощающая, если $N_2 = N_1$ – среда прозрачная.

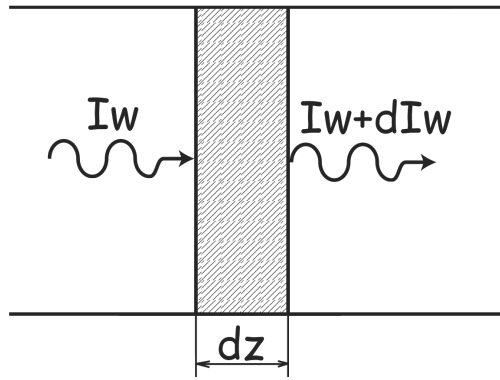


Рис. 1.4. Усиление света в активной среде

Известно, что при термодинамическом равновесии населенности энергетических уровней описываются статистикой Больцмана. Так, если N_1 и N_2 – населенности двух уровней при термодинамическом равновесии, то мы имеем

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp \left(-\frac{E_2 - E_1}{kT} \right), \quad (1.9)$$

где k — постоянная Больцмана, T — термодинамическая температура. Анализируя выражение (1.9), становится ясным, что в случае термодинамического равновесия $N_2 < N_1$, то есть среда является поглощающей, а для создания усиливающих сред необходимо достижения неравновесного состояния или так называемого состояния с инверсной заселённостью, для которой справедливо соотношение $N_2 > N_1$. Среда, в которой удаётся добиться инверсной заселённости (среда с “отрицательной” температурой), называется активной средой. Если частота ν перехода попадает в СВЧ-диапазон — такой усилитель называется мазер, если в оптическом диапазоне — лазер. Название лазер берёт от английской аббревиатуры LASER (Light Amplification by Stimulation of Emission Radiation) — усиление света за счет вынужденного (индуцированного) излучения.

Наличие усиливающей среды является необходимым условием для создания оптического квантового генератора. Для этого необходимо ввести подходящую положительную обратную связь. В мазерах это достигается тем, что активную среду помещают в объемный резонатор, имеющий резонанс при частоте ν . В лазере обратную связь обычно получают размещением активной среды между двумя зеркалами с высоким коэффициентом отражения. Такую систему обратной связи называют резонатором Фабри—Перо. Простейший резонатор состоит из двух плоскопараллельных зеркал, как показано на рис. 1.5. В этом случае плоская электромагнитная волна, распространяющаяся в направлении, перпендикулярном зеркалам, будет поочередно отражаться от них, усиливаясь при каждом прохождении через активную среду. Если одно из двух зеркал сделано частично прозрачным, то на выходе системы можно выделить пучок полезного излучения.

В лазере генерация излучения начинается тогда, когда усиление активной среды компенсирует потери в нем (скажем, потери, обусловленные частичным выходом излучения из резонатора через зеркало). В соответ-

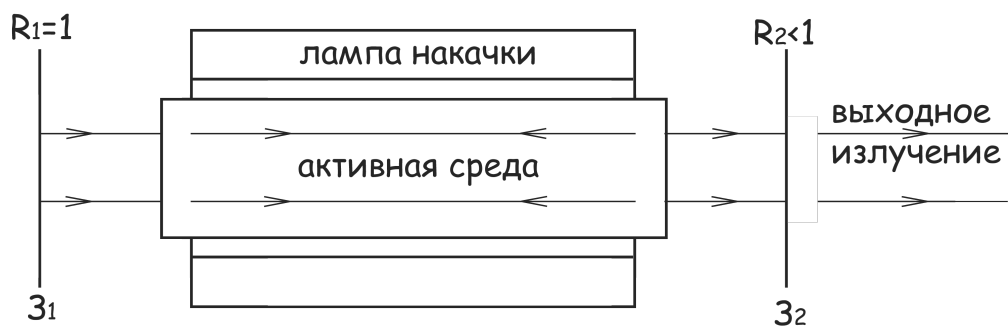


Рис. 1.5. Схематическое изображение устройства лазера

ствии с выражением (1.8) усиление излучения за один проход в активной среде (т. е. отношение выходной и входной плотностей потока фотонов) равно $\exp(B(N_2 - N_1)l)$, где l — длина активной среды. Если потери в резонаторе определяются только пропусканием зеркал, то порог генерации будет достигнут при выполнении условия $R_1 R_2 \exp(2B(N_2 - N_1)l) = 1$, где R_1 и R_2 — коэффициенты отражения зеркал по интенсивности. Это условие показывает, что порог достигается тогда, когда инверсия населенностей приближается к некоторому критическому значению $(N_2 - N_1)_{kr}$, называемому критической инверсией и определяемому соотношением

$$(N_2 - N_1)_{kr} = -\frac{\ln(R_1 R_2)}{2Bl}. \quad (1.10)$$

Как только достигнута критическая инверсия, генерация разовьется из спонтанного излучения. Действительно, фотоны, которые спонтанно испускаются вдоль оси резонатора, будут усиливаться. Этот механизм и лежит в основе лазерного генератора, называемого обычно просто лазером. Однако теперь слово лазер широко применяется к любому устройству, испускающему вынужденное излучение — будь то в дальнем или ближнем ИК-, УФ- и даже в рентгеновском диапазонах. В таких случаях мы будем говорить соответственно об инфракрасных, ультрафиолетовых и рентгеновских лазерах. Заметим также, что названия твердотельный, жидкостный и газовый лазер определяются агрегатным состоянием активной среды.

1.5. Схемы накачки

Рассмотрим принципы получения инверсной заселённости энергетических уровней ($N_2 > N_1$). Нетрудно показать, что невозможно обеспечить инверсию заселённости, используя 2-х уровневую схему накачки. Даже при интенсивной накачке активной среды волной с высокой плотностью энергии в момент, когда наступят условия, при которых населенности уровней окажутся одинаковыми ($N_2 = N_1$), процессы вынужденного излучения и поглощения начнут компенсировать друг друга, и в соответствии с (1.8) среда станет прозрачной. В такой ситуации обычно говорят о двухуровневом насыщении.

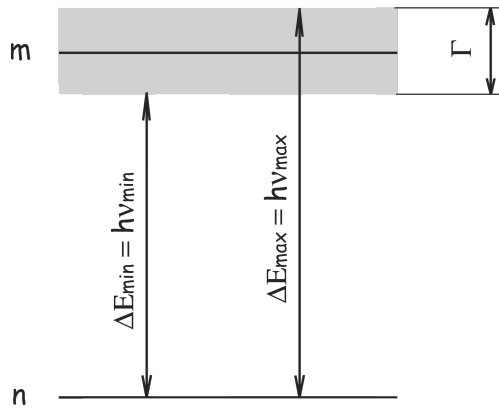


Рис. 1.6. Естественная ширина энергетического уровня

Таким образом, используя только два уровня, невозможно получить инверсию населенностей. Естественно, возникает вопрос: можно ли это осуществить с использованием более чем двух уровней из неограниченного набора состояний данной атомной системы? Для ответа рассмотрим вопрос о соотношении между средним временем жизни τ и шириной Γ энергетического уровня. Спектральная линия имеет конечную ширину (см. рис. 1.6). Одной из причин возникновения конечной ширины энергетического уровня является соотношение неопределённостей Гейзенберга:

$$\Gamma \cdot \tau \gtrsim \hbar, \quad (1.11)$$

где Γ — естественная ширина уровня энергии, $\hbar = h/2\pi$ — постоянная Планка.

Различные уровни энергии атомов или молекул имеют различную ширину Γ энергетического уровня, а следовательно, и различное среднее значение времени, в течении которого атом может находиться в этом энергетическом состоянии (время жизни). Подобное обстоятельство позволяет создать инверсную заселённость энергетических уровней, используя трёх- или четырёхуровневую схему накачки.

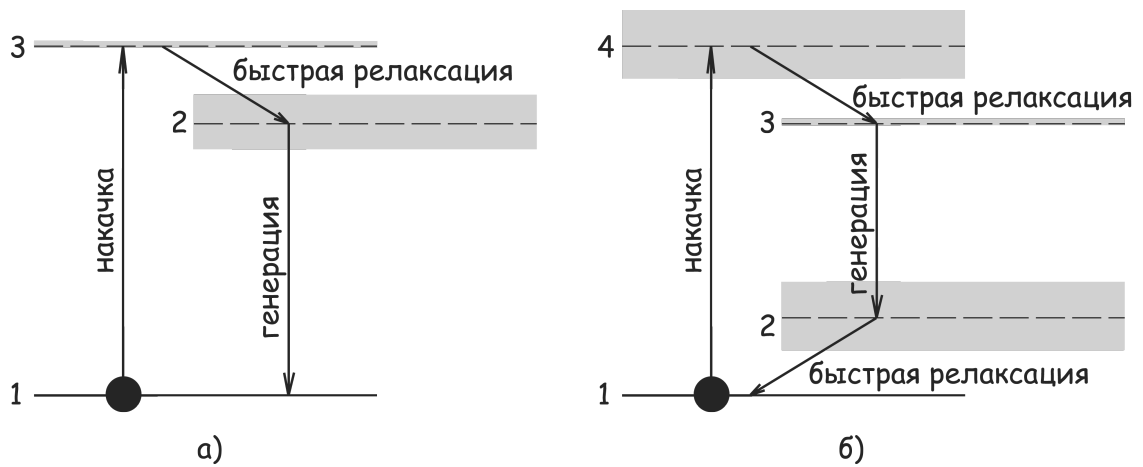


Рис. 1.7. Естественная ширина энергетического уровня

В трёхуровневом лазере (рис. 1.7а) атомы накачкой переводятся с основного уровня 1 на уровень 3. Если выбрана среда, в которой атом, оказавшийся в возбужденном состоянии на уровне 3, быстро переходит на уровень 2, то в такой среде можно получить инверсию населенностей между уровнями 2 и 1. В четырёхуровневом лазере (рис. 1.7б) атомы также переводятся с основного уровня на уровень 4. Если после этого атомы быстро переходят на уровень 3, то между уровнями 3 и 2 может быть получена инверсия населенностей. Когда в таком четырёхуровневом лазере возникает генерация, атомы в процессе вынужденного излучения переходят с уровня 3 на уровень 2. Поэтому для непрерывной работы четырёхуровневого лазера необходи-

мо, чтобы частицы, оказавшиеся на уровне 2, очень быстро переходили на первый уровень.

Мы показали, каким образом можно использовать три или четыре энергетических уровня какой-либо системы для получения инверсии населенностей. В четырёхуровневом лазере инверсию получить гораздо легче. Чтобы убедиться в этом, прежде всего заметим, что разности энергий между рабочими уровнями лазера обычно много больше, чем kT , и в соответствии со статистикой Больцмана (1.9) почти все атомы при термодинамическом равновесии находятся в основном состоянии. Если мы теперь обозначим число атомов в единице объема среды как N_t , то в случае трехуровневой системы эти атомы первоначально будут находиться на уровне 1. Переведем теперь атомы с уровня 1 на уровень 3. Тогда с этого уровня атомы будут релаксировать с переходом на более низкий уровень 2. Если такая релаксация происходит достаточно быстро, то уровень 3 остается практически незаселенным. В этом случае, для того чтобы населенности уровней 1 и 2 сделать одинаковыми, на уровень 2 нужно перевести половину атомов N_t , расположенных первоначально на основном уровне. Инверсию населенностей будет создавать любой атом, переведенный на верхний уровень сверх этой половины от общего числа атомов. Однако в четырёхуровневом лазере, поскольку уровень 2 первоначально был также незаселенным, любой атом, оказавшийся в возбужденном состоянии, будет давать вклад в инверсию населенностей. Эти простые рассуждения показывают, что по возможности следует искать активные среды, работающие по четырёхуровневой схеме. Для получения инверсии населенностей возможно, разумеется, использование и большего числа энергетических уровней.

На трёхуровневой накачке осуществлён рубиновый лазер: кристалл корунда (Al_2O_3), в котором небольшая часть ионов Al^{3+} замещена ионами хрома Cr^{3+} (0.05 вес. %). Именно ионы хрома и придают рубину насыщен-

ный красный цвет. На четырёхуровневой накачке осуществлён неодимовый лазер. Активной средой в этом лазере является иттрий алюминиевый гранат ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$), в котором часть ионов Y^{3+} замещена ионами неодима Nd^{3+} (1 вес. %).

Процесс, под действием которого атомы переводятся с уровня 1 на уровень 3 (в трёхуровневой схеме лазера) или с уровня 1 на уровень 4 (в четырёхуровневой схеме), называется накачкой. Имеется несколько способов, с помощью которых можно реализовать этот процесс на практике, например при помощи некоторых видов ламп, дающих достаточно интенсивную волну с необходимой для накачки частотой ν . Другой способ заключается в использовании для накачки других лазеров, например полупроводниковых лазеров или сверх ярких светодиодов. В этом случае резко увеличивается КПД лазера.

1.6. Свойства лазерного излучения

Лазерное излучение характеризуется чрезвычайно высокой степенью монохроматичности, когерентности, направленности и яркости. К этим свойствам можно добавить генерацию световых импульсов малой длительности. Это свойство, возможно, менее фундаментально, но оно играет очень важную роль. Рассмотрим некоторые из этих свойств подробнее.

1.6.1. Монохроматичность

Не слишком вдаваясь в детали, можно сказать, что это свойство определяется двумя следующими обстоятельствами: 1) усиливаться может электромагнитная волна только с частотой ν , определяемой выражением (1.1); 2) поскольку устройство из двух зеркал образует резонатор, генерация может возникать только на резонансных частотах этого резонатора. Последнее обстоятельство приводит к тому, что ширина линии лазерного

излучения часто бывает много уже (приблизительно на шесть порядков величины!), чем обычная ширина линии перехода $2 \rightarrow 1$, которая наблюдается при спонтанном излучении.

1.6.2. Когерентность

Для любой электромагнитной волны можно определить два независимых понятия когерентности, а именно пространственную и временную когерентность. Для того чтобы определить пространственную когерентность, рассмотрим две точки P_1 и P_2 , выбранные с таким условием, что в момент времени $t = 0$ через них проходит волновой фронт некоторой электромагнитной волны, и пусть $E_1(t)$ и $E_2(t)$ — соответствующие электрические поля в этих точках. Согласно нашему условию в момент времени $t = 0$ разность фаз электрических полей в данных точках равна нулю. Если эта разность фаз остается равной нулю в любой момент времени $t > 0$, то говорят, что между двумя точками имеется полная когерентность. Если такое условие выполняется для любых пар точек волнового фронта, то данная волна характеризуется полной пространственной когерентностью. Практически для любой точки P_i , если мы имеем достаточную корреляцию фаз, точка P_2 должна располагаться внутри некоторой конечной области, включающей точку P_1 . В этом случае говорят, что волна характеризуется частичной пространственной когерентностью, причем для любой точки P можно соответственно определить область когерентности $C(P)$.

Для того чтобы определить временную когерентность, рассмотрим электрическое поле волны в данной точке P в моменты времени t и $t + \tau$. Если для данного интервала времени τ разность фаз колебаний поля остается одной и той же в любой момент времени t , то говорят, что существует временная когерентность на интервале времени τ . Если такое условие выполняется для любого значения τ , то волна характеризуется полной временной

когерентностью. Если же это имеет место лишь для определенного интервала времени τ , такого, что $0 < \tau < \tau_0$, то волна характеризуется частичной временной когерентностью с временем когерентности τ_0 .

1.7. Режимы генерации лазерного излучения

1.7.1. Непрерывный режим

В этом режиме скорость накачки активной среды не зависит от времени. При этом скорость накачки должна быть такой, чтобы все время поддерживать инверсию заселённости, то есть $W > W_{кр}$, где $W_{кр}$ — критическая мощность накачки, при которой создаётся инверсная заселённость. Такая накачка приводит к стационарному режиму излучения.

1.7.2. Режим модуляции добротности

Метод модуляции добротности позволяет получать лазерную генерацию в виде коротких импульсов (длительностью от нескольких наносекунд до нескольких десятков наносекунд) с высокой пиковой мощностью (до нескольких десятков мегаватт). Основная идея метода состоит в следующем. Предположим, что в резонатор лазера помещен затвор. Если затвор закрыт, то генерация возникнуть не может, и инверсия населенностей может достичь значения, которое намного превышает пороговое, имеющее место в отсутствие затвора. Если теперь резко открыть затвор, то усиление в лазере существенно превысит потери, и накопленная энергия выделится в виде короткого и интенсивного светового импульса. Поскольку при этом происходит переключение добротности резонатора от низкого значения к высокому, то данный метод называется модуляцией добротности.

В качестве прибора для модуляции добротности может использоваться акустооптический модулятор добротности. Акустооптический модулятор

представляет собой участок оптически прозрачной среды (например, плавленого кварца для видимой области или германия для среднего и дальнего ИК-диапазона), в котором с помощью прикрепленного с одной стороны пьезоэлектрического преобразователя, подключенного к ВЧ-генератору, возбуждается ультразвуковая волна (рис. 1.8а). Если противоположная преобразователю сторона участка прозрачной среды срезана под некоторым углом и на нее нанесен поглотитель для акустической волны, то отражения назад не будет и в среде возникает бегущая акустическая волна. Механическое напряжение, наведенное ультразвуковой волной, вызовет локальные изменения показателя преломления среды (фотоупругий эффект). Это периодическое изменение показателя преломления можно рассматривать как фазовую дифракционную решетку, период которой равен длине акустической волны, а амплитуда пропорциональна амплитуде звука, и которая передвигается в среде со скоростью звука (фазовая решетка бегущей волны). Если акустооптическую ячейку поместить в резонатор лазера, то до тех пор, пока к преобразователю приложено электрическое напряжение, в резонаторе существуют дополнительные потери. Действительно, часть лазерного пучка выводится из резонатора вследствие дифракции излучения на наведенной фазовой решетке. Если приложенное напряжение достаточно велико, то дополнительные потери приведут к прекращению лазерной генерации. Возвращение лазера в состояние с высокой добротностью происходит при выключении электрического напряжения на преобразователе.

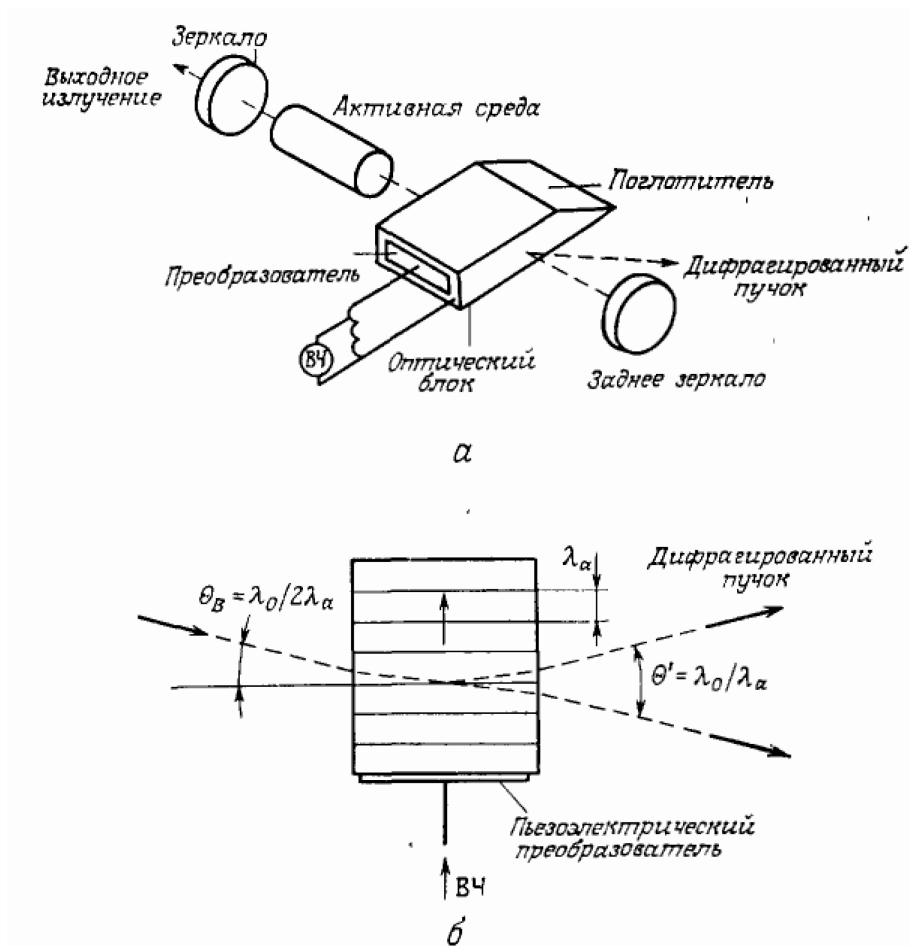


Рис. 1.8. Лазер с модуляцией добротности: а — схема устройства лазера, в котором модуляция добротности осуществляется с помощью акустооптического модулятора; б — падающий, прошедший и дифрагированный пучки в акустооптическом модуляторе (брэгговский режим)

1.8. Типы лазеров

1.8.1. Твердотельные лазеры

Твердотельными называются, как правило, лазеры, активной средой которых является либо диэлектрический кристалл, либо стекло. В твердотельных лазерах активными центрами являются примесные ионы, введенные в кристалл. Обычно такой ион принадлежит одной из групп переходных элементов Периодической системы элементов Менделеева (например, ионы переходных металлов, особенно Cr^{3+} , или ионы редкоземельных элементов, главным образом Nd^{3+} или Er^{3+}). Используемые для генерации переходы включают электронные уровни незаполненных внутренних оболочек. Поэтому такие переходы слабо подвержены влиянию кристаллического поля. Кроме того, эти переходы запрещены в приближении электродипольного взаимодействия. Поэтому время спонтанной релаксации попадает в миллисекундный, а не в наносекундный диапазон, как в случае электродипольно разрешенных переходов. Обе указанные выше особенности приводят к следующим важным последствиям для лазерной генерации. Во-первых, безызлучательные каналы релаксации довольно слабы. Следовательно, время жизни верхнего уровня τ примерно равно спонтанному времени жизни, то есть оно попадает в миллисекундный диапазон. Поскольку для трехуровневого лазера (такого, как рубин с ионами Cr^{3+} или ионы Er^{3+} на переходе $\lambda = 1,54$ мкм) критическая скорость накачки W_{kr} равна $1/\tau$, величина W_{kr} оказывается достаточно малой, чтобы обеспечить лазерную генерацию. Во-вторых, ширина линии перехода $\Delta\nu_0$ относительно невелика, поскольку механизмы уширения относительно неэффективны. Для четырехуровневого лазера (такого, как на ионах Nd^{3+}) пороговая скорость накачки W_{kr} пропорциональна $1/(\sigma\tau_{sp})$.

Рубиновый лазер

Этот лазер был первым, на котором была осуществлена генерация (Т. Х. Майман, июнь 1960 г., см. рис 1.9) и который все еще находит применение. Рубин, сотни лет известный как природный драгоценный камень, представляет собой кристалл Al_2O_3 (корунд), в котором ряд ионов Al^{3+} замещены ионами Cr^{3+} . Кристаллы рубина, применяемые в лазерах в качестве активной среды, обычно получают путем выращивания из расплава смеси Al_2O_3 и небольшой части Cr_2O_3 (0,05 вес. %). Без добавления Cr_2O_3 формирующийся кристалл (сапфир) становится бесцветным, и необходимо добавить совсем немного Cr_2O_3 , чтобы кристалл приобрел розовый оттенок (розовый рубин) вследствие наличия у ионов Cr^{3+} зеленой и фиолетовой полос поглощения. Заметим, что в природных драгоценных камнях концентрация Cr^{3+} приблизительно на порядок больше, чем в искусственных, что придает им насыщенную красную окраску (красный рубин).

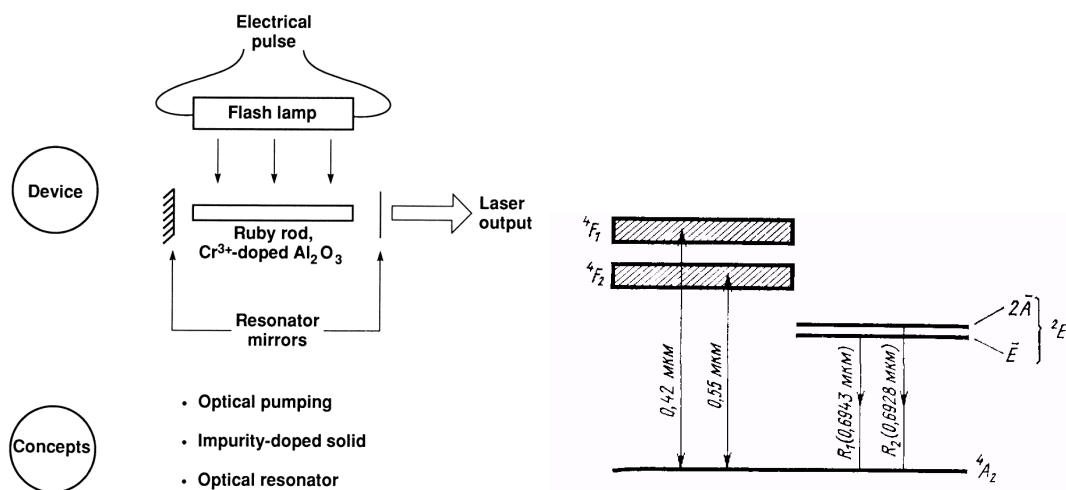


Рис. 1.9. Схема рубинового лазера и энергетических уровней рубина

Энергетические уровни рубина образуются за счет трех электронов во внутренней $3d$ оболочке иона Cr^{3+} , находящихся под действием октаэдрического поля решетки AL_2O_3 . Рубин имеет две основные полосы поглощения 4F_1 и 4F_2 , причем наиболее интенсивное поглощение на эти полосы из

основного состояния 4A_2 происходит на длинах волн соответственно 0,55 мкм (зеленая) и 0,42 мкм (фиолетовая). Эти полосы связаны очень быстрой (за время порядка пикосекунд) безызлучательной релаксацией с состоянием как $2A$, так и E . Поскольку эти два последних состояния также связаны друг с другом очень быстрой безызлучательной релаксацией (10^{-9} с), то их населенности термализуются, что приводит к более высокой населенности уровня E . Однако время релаксации в основное состояние как уровня $2A$, так и E , довольно большое, поскольку, как уже отмечалось, оба перехода запрещены как электродипольно, так и по спину.

Из проведенного выше рассуждения теперь ясно, что на уровне E накапливается большая доля энергии накачки, и, следовательно, этот уровень хорошо подходит на роль верхнего лазерного уровня. Действительно, лазерная генерация в рубине имеет место на переходе $E \rightarrow {}^4A_2$ (линия R_1) с длиной волны $\lambda = 694,3$ нм (красная). Однако следует заметить, что расстояние между $2A$ и E по частоте (29 см^{-1}) мало по сравнению с kT/h (208 см^{-1}), и, следовательно, населенность уровня $2A$ сравнима с населенностью уровня E или немного меньше ее. Кроме того, мы видим, что можно также получить генерацию и на переходе $2A \rightarrow {}^4A_2$ (линия R_2 , $\lambda = 692,8$ нм). Усиление на линии R_2 несколько меньше, чем на R_1 . Из предыдущего рассмотрения очевидно, что рубиновый лазер работает по трехуровневой схеме и вместе с лазером на стекле с ионами Er^{3+} он составляет наиболее примечательный пример трехуровневого лазера.

Поскольку рубиновый лазер на самом деле работает по трехуровневой схеме, необходимая пороговая энергия накачки приблизительно на порядок превышает соответствующую величину для Nd:YAG лазера таких же размеров. Однако рубиновые лазеры все еще широко применяются в некоторых научных и технических приложениях, для которых более короткая длина волны генерации рубина дает существенное преимущество перед Nd:YAG-

лазером (например, в импульсной голографии, где Nd:YAG нельзя использовать из-за малой чувствительности фотопленки в более длинноволновом диапазоне генерации Nd:YAG-лазера). Стоит также отметить, что в прошлом рубиновые лазеры активно использовались для военных целей при измерении дальности, где этот лазер теперь полностью заменен Nd:YAG-лазером и лазером на стекле с неодимом.

Неодимовые лазеры

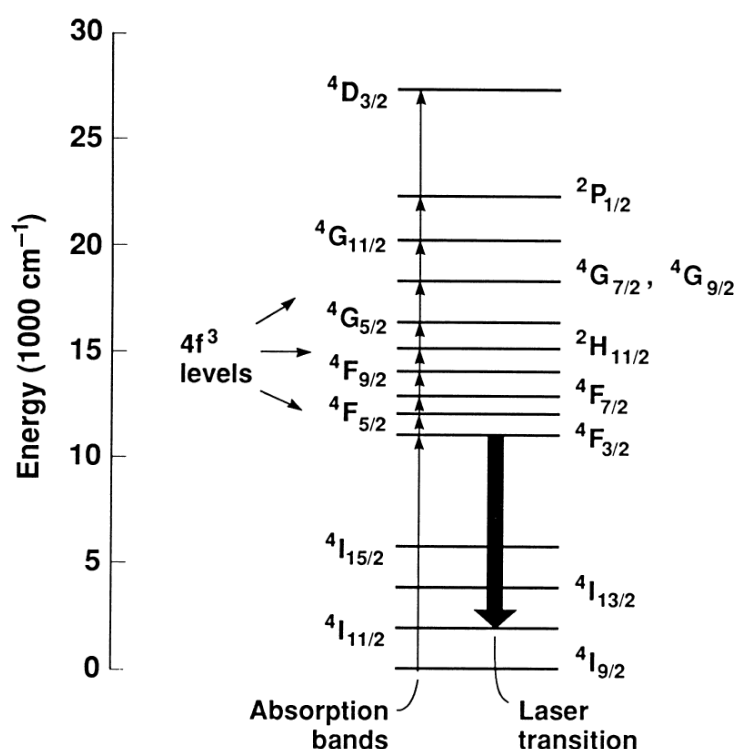


Рис. 1.10. Схема энергетических уровней кристалла Nd:YAG

Неодимовые лазеры являются самыми популярными из твердотельных лазеров. В этих лазерах активной средой обычно является кристалл $Y_3Al_5O_{12}$, сокращенно называемый YAG (yttrium aluminum garnet, иттрий-алюминиевый гранат), в котором часть ионов Y^{3+} замещена ионами Nd^{3+} . Иногда также используется фосфатное или силикатное стекло, легированное ионами Nd^{3+} . Типичные уровни легирования для кристалла Nd:YAG составляют порядка 1 ат. %. Более высокие уровни легирования ведут к

тушению люминесценции, а также к внутренним напряжениям в кристаллах, поскольку радиус иона Nd^{3+} примерно на 14 % превышает радиус иона Y^{3+} . Этот уровень легирования придает прозрачному кристаллу YAG бледно-пурпуровую окраску, поскольку линии поглощения Nd^{3+} лежат в красной области. Уровни легирования стекла с неодимом немного выше этой же величины для Nd:YAG (3 вес. % Nd_2O_3).

На рис. 1.10 представлена упрощенная схема энергетических уровней Nd:YAG. Эти уровни обусловлены переходами трех $4f$ электронов внутренней оболочки иона Nd^{3+} . Поскольку эти электроны экранируются восемью внешними электронами ($5s^2$ и $5p^6$), на упомянутые энергетические уровни кристаллическое поле влияет лишь в незначительной степени. Поэтому спектральные линии, соответствующие рассматриваемым переходам, относительно узки. Две основные полосы накачки расположены на длинах волн 0,73 и 0,8 мкм соответственно, хотя другие более высоко лежащие полосы поглощения также играют важную роль. Эти полосы связаны быстрой (10^{-7} с) безизлучательной релаксацией с уровнем $^4F_{3/2}$, откуда идет релаксация на нижние уровни (а именно $^4I_{9/2}$, $^4I_{11/2}$ и $^4I_{13/2}$). Однако скорость релаксации намного меньше ($\tau = 0,23$ мс), поскольку переход запрещен в приближении электродипольного взаимодействия (правило отбора для электродипольно разрешенных переходов имеет вид $\Delta J = 0$ или ± 1) и поскольку безизлучательная релаксация идет медленно вследствие большого энергетического зазора между уровнем $^4F_{3/2}$ и ближайшим к нему нижним уровнем. Это означает, что уровень $^4F_{3/2}$ запасет большую долю энергии накачки, и поэтому хорошо подходит на роль верхнего лазерного уровня.

Из сказанного выше ясно, что в кристалле Nd:YAG переход $^4F_{3/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$ хорошо подходит для получения лазерной генерации в четырехуровневой схеме. Большое время жизни верхнего лазерного уровня

($\tau = 0,23$ мс) позволяет Nd:YAG быть весьма хорошим для работы в режиме модулированной добротности.

Nd:YAG лазеры могут работать как в непрерывном, так и в импульсном режиме. В обоих случаях обычно используются линейные лампы в схемах с одноэллипсным осветителем, с близким расположением лампы и кристалла или с многоэллипсным осветителем. Для работы в импульсном и непрерывном режимах применяются соответственно ксеноновые лампы среднего давления (500 — 1500 мм рт. ст.) и криптоновые лампы высокого давления (4–6 атм). Выходные параметры Nd: YAG-лазера оказываются следующими: 1) в непрерывном многомодовом режиме выходная мощность до 200 Вт; 2) в импульсном лазере с большой скоростью повторения импульсов (50 Гц) средняя выходная мощность порядка 500 Вт; 3) в режиме модулированной добротности максимальная выходная мощность до 50 МВт; 4) в режиме синхронизации мод длительность импульса до 20 пс. Как в импульсном, так и в непрерывном режиме дифференциальный КПД составляет около 1-3%. Nd:YAG-лазеры широко применяются в различных областях: 1) измерение расстояний (в большинстве лазерных дальномеров для военных целей и прицельных устройств используются Nd:YAG-лазеры); 2) применение в науке (лазеры с модулированной добротностью); 3) обработка материалов (резка, сверление, сварка и т. д.); 4) применение в медицине (фотокоагуляция).

1.8.2. Оптоволоконные лазеры

Оптические генераторы, которые как правило называют лазерами, являются оптическими системами обратной связи, в которых два основных условия должны быть выполнены для создания стабильных колебаний: усиление при двукратном проходе активной среды должно быть целым; сдвиг фаз при двукратном проходе должен составлять угол, равный произведе-

нию любого целого числа на 2π радиан. Соответственно существуют два основных элемента и в любом оптоволоконном лазере: активная среда оптического усиления; оптическая обратная связь. В дальнейшем волоконные лазеры будем определять как лазеры, в которых оптический элемент усиления и элемент обратной связи совместно размещены в оптоволокне. Дополнительные элементы могут быть добавлены для обеспечения обратной связи или для контроля временных и спектральных характеристик лазера.

Простой пример оптоволоконного лазера схематически показан на рис. 1.11. Лазер накачки обеспечивает поступление энергии для активной среды усилителя. Для того, чтобы преодолеть порог генерации лазера и создать когерентное оптическое излучение, активная среда должна производить достаточное усиление для преодоления потерь, включая потери обратной связи. Поглощенная мощность накачки, необходимая для достижения порога генерации, приблизительно равна

$$P_{th} = \alpha_{cav} \alpha_p h \nu_p / (\sigma_s \tau_1), \quad (1.12)$$

в котором $\alpha_{cav} = \alpha_i n t - \ln(1 - T)$ представляет собой совокупность внутренних потерь и потерь на генерацию излучения в резонаторе на один проход, α_p — постоянная, определяемая режимом накачки, ν_p — частота накачки, σ_s — сечение индуцированного излучения, τ_1 — время жизни в возбужденном состоянии.

Широкий спектр длин волн лазерной генерации, как показано на рис. 1.12, доступен при использовании силикатных волокон, легированных редкоземельными металлами. Наибольшее применение нашли лазеры на редких землях: эрбия $\lambda = 1,55$ мкм, неодима $\lambda = 1,06$ мкм и итербия $\lambda = 1,065$ мкм.

В большинстве практических случаев используются импульсные оптоволоконные лазеры, в которых периодическое излучение создается методом модуляции добротности. Типичные лазеры с модуляцией добротности

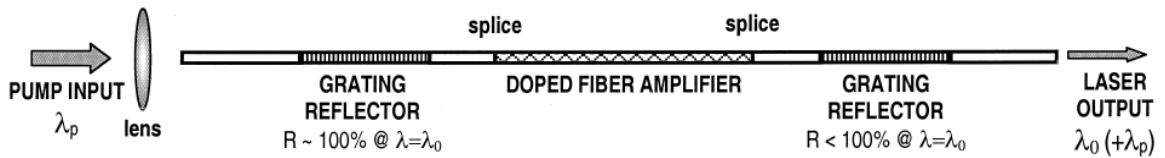


Рис. 1.11. Простейшая схема волоконного лазера. Два рефлектора на решетках Брэгга образуют стоячую волну в резонаторе, содержащем волокна оптического усилителя. Оптическая накачка поступает с одного из концов волокна через зеркало, пропускающее длину волны накачки и полностью отражающее длину волны лазерной генерации. Кроме этого, лазерное излучение может выходить с другого конца волокна через решетку Брэгга со значением отражения на длине волны генерации $< 100\%$

имеют энергию импульса в несколько сотен мкДж, продолжительность импульса десятки наносекунд и пиковую мощность несколько киловатт. Новые результаты исследований показывают, что при тщательной разработке иттербиевого лазера можно генерировать импульсы с энергией более 1 мДж, пиковой мощностью до 10 кВт. При такой мощности излучения может возникнуть внутрирезонансное излучение за счет многокаскадного комбинационного рассеяния, что ведёт к деградации излучения.

Оптоволоконные лазеры нашли широкое применение во многих областях благодаря своей гибкости (в буквальном смысле!). Гибкое оптоволокно позволяет доставить излучение/сигнал куда угодно, что и определило современное невероятно широкое использование этих лазеров в прецизионной лазерной обработке (например в маркировке изображений), в измерителях температуры и микродеформаций, телекоммуникационных системах, медицине (анализ и хирургия) и многих других.

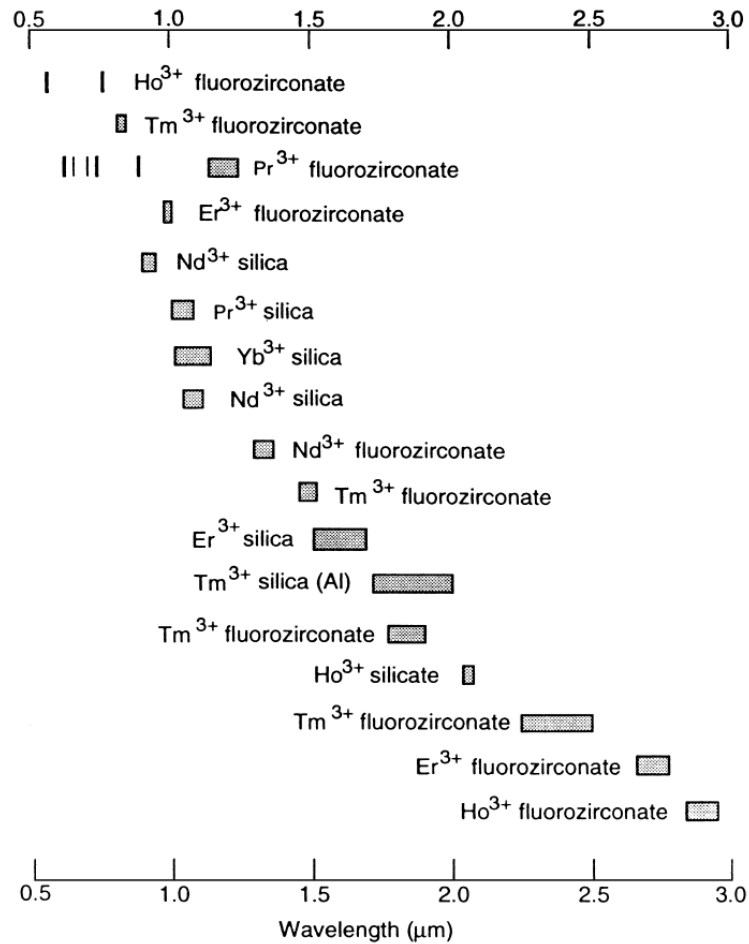


Рис. 1.12. Диапазоны генерации редкоземельных ионов, легированных в стеклянной матрице [6]

1.8.3. Полупроводниковые лазеры

Полупроводниковые лазеры отличаются высокой эффективностью среди оптических квантовых генераторов. Одной из ключевых характеристик является то, что эти устройства весьма малы, с характерными линейными размерами порядка нескольких сотен микрон на сторону. Эти лазеры относятся к классу твердотельных лазеров, которые, в отличие от обычных твердотельных лазеров, изготавливаются из полупроводниковых материалов. Накачка полупроводниковых лазеров осуществляется напрямую из электрического тока, который передается через прибор. Типичные пороговые токи для возбуждения генерации в этих устройствах составляют поряд-

ка нескольких миллиампер, а коэффициент преобразования энергии между инжектированными электронами и порожденными фотонами превышает 90%. Полупроводниковые лазеры, как правило, построены из нескольких слоев полупроводникового материала.

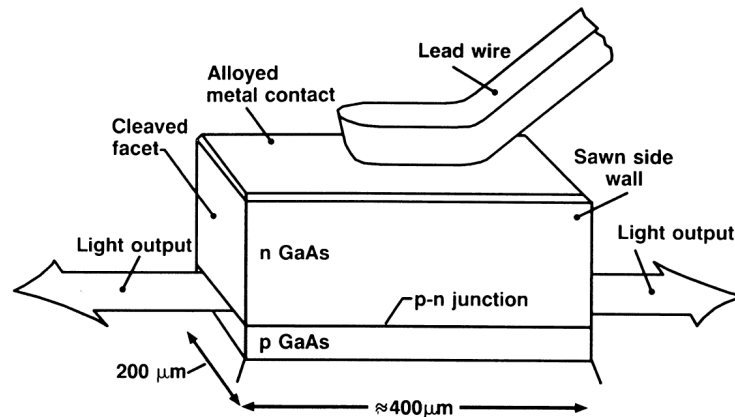


Рис. 1.13. Схема полупроводникового лазера

Первые полупроводниковые лазеры были сделаны из арсенида галлия (см. рис. 1.13). Арсенид галлия был выращен так, что $p-n$ -переход, или диод, был сформирован внутри кристалла. Чип был на металлической основе с контактным проводом для подачи электрического тока. Гладкие торцы на диоде выступали в качестве зеркал, обеспечивающих оптическую обратную связь, необходимую для генерации когерентного излучения, а боковые стороны были шероховатыми для предотвращения лазерной генерации в направлении, перпендикулярном желательному направлению излучения.

Основные принципы генерации лазерного излучения могут быть получены посредством изучения диаграммы энергетических уровней $p-n$ -перехода прямозонных полупроводников. Величина ширины запрещённой зоны имеет важное значение при генерации света в полупроводниковых лазерах, поскольку именно она определяет энергию испускаемых фотонов. Для изготовления лазеров используются прямозонные полупроводники. В прямозонных полупроводниках экстремумы зон находятся при одном и том

же значении волнового вектора, и генерация света происходит с большей вероятностью. В непрямозонных полупроводниках потолок валентной зоны и дно зоны проводимости разнесены в пространстве волновых векторов, для выполнения закона сохранения импульса нужно ещё испустить фотон с большим квазиимпульсом, и поэтому вероятность излучательной рекомбинации существенно ниже.

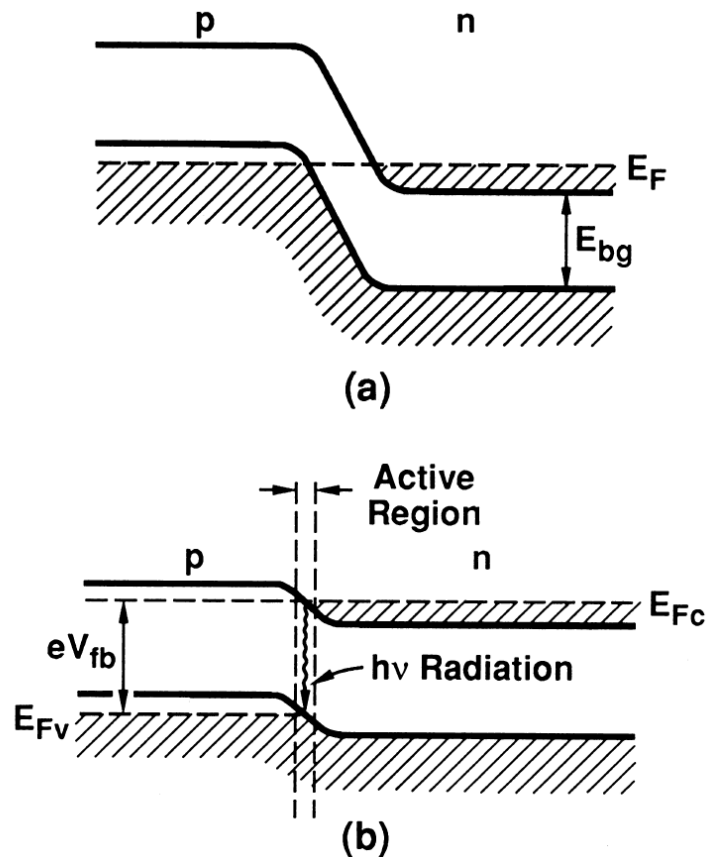


Рис. 1.14. Энергетическая диаграмма: а — вырожденный $p - n$ -переход при нулевом смещении; б — смещение уровня при подаче положительного напряжения сравнимо с шириной запрещенной зоны

Рисунок 1.14 показывает типичную энергетическую диаграмму $p - n$ -перехода прямозонных полупроводников. Два полупроводниковых слоя с противоположным легированием выращиваются до совмещения друг с другом, при этом n -легированная сторона имеет избыточное число электронов, p -легированная сторона имеет избыточное число дырок. Концентрация

легирования, как правило, составляет 10^{18} см^{-3} , которая гарантирует, что уровень Ферми, показанный штриховой линией на рис. 1.14а, находится в пределах как верхнего уровня или в зоне проводимости n -легированной стороны, так и низкого уровня или в валентной зоне p -легированной стороны.

В термодинамическом равновесии электроны и дырки не могут рекомбинировать друг с другом из-за потенциального барьера, который существует между переходом $p-n$. При подаче напряжения на переход в прямом направлении потенциальный барьер снижается. Если подаваемое напряжение увеличивается до уровня, который почти равен ширине запрещенной зоны, как показано на рис. 1.14б:

$$V_{fb} = \frac{E_{bg}}{e}, \quad (1.13)$$

то электроны и дырки вводятся в активную области $p-n$ -перехода. В приведенном выше уравнении V_{fb} — напряжение прямого смещения, E_{bg} — энергия запрещенной зоны. Это смещение создает условия инверсной населенности в активной среде, что является необходимым условием для лазерной генерации. В смещенном состоянии электроны и дырки могут рекомбинировать друг с другом непосредственно, испуская фотоны, с энергией, удовлетворяющей соотношению

$$E_{bg} < h\nu < E_{FC} - E_{FV}, \quad (1.14)$$

где E_{FC} и E_{FV} являются уровнями Ферми в зоне проводимости и в валентной зоне соответственно. После возникновения и усиления излучения торцы в концах полупроводников обеспечивают оптическую обратную связь. Усиление в полупроводниковых лазерах может достигать 1000 раз за один проход. В связи с этим большой коэффициент усиления и относительно низкие потери достаточны для начала генерации излучения. Типичные коэффициенты отражения от сколов торцевой поверхности полупроводников примерно равны 30%, по сравнению с 60-99% для твердотельных лазеров.

С развитием полупроводниковых лазеров наблюдается быстро растущее их применение во многих устройствах благодаря компактным размерам, эффективности преобразования электрического тока в излучение и очень недорогой стоимости. Невероятно высокая эффективность получена при применении полупроводниковых лазеров для накачки других лазеров, например, оптоволоконных лазеров. Благодаря этому КПД оптоволоконного лазера приближается к 40%. Огромной областью применения диодных лазеров является также сфера оптической телекоммуникации. Большое применение такие лазеры нашли и в бытовых устройствах (лазеры-указки, лазеры в компакт-дисках и т.д.).

1.8.4. Газовые лазеры

Спектральные линии в газах имеют низкую ширину (ширина порядка нескольких гигагерц и меньше), поскольку действующие в газах механизмы уширения слабее, чем в твердых телах. Действительно, в газах, находящихся при обычных для лазеров давлениях (несколько мм рт. ст.), столкновительное уширение очень мало, и ширина линий определяется главным образом доплеровским уширением. В связи с этим в газовых лазерах не используется, как в твердотельных лазерах, оптическая накачка с помощью ламп. В самом деле, такая накачка была бы крайне неэффективна, поскольку спектр излучения этих ламп является более или менее непрерывным, в то время как в активной газовой среде нет широких полос поглощения.

Газовые лазеры накачиваются, как правило, электрически, то есть накачка достигается при пропускании достаточно сильного (постоянного, высокочастотного или импульсного) тока через газовую среду.

Из возбужденного состояния частица может перейти на более низкие энергетические уровни (в том числе и в основной) благодаря четырем различным процессам: 1) столкновениям возбужденной частицы с электроном,

при которых частица передает свою энергию электрону (столкновения второго рода); 2) столкновениям между атомами (в газовой смеси, состоящей из более чем одной компоненты); 3) столкновениям частицы со стенками сосуда и 4) спонтанному излучению. В случае последнего процесса следует всегда учитывать возможность захвата излучения (особенно для обычно очень сильных переходов в УФ- и ВУФ-диапазоне). Этот процесс уменьшает эффективную вероятность спонтанного излучения. При постоянном значении тока электрического разряда все эти процессы возбуждения и релаксации приводят в конечном счете к установлению некоторого равновесного распределения населенности по энергетическим уровням. Таким образом можно видеть, что в газовых лазерах из-за большого числа протекающих в газах процессов механизм создания инверсии населенностей является более сложным по сравнению с твердотельными лазерами. Вообще говоря, инверсия населенностей между двумя данными уровнями возникает при выполнении одного (или обоих) следующих условий: 1) скорость возбуждения верхнего лазерного уровня больше, чем нижнего, и 2) скорость релаксации верхнего лазерного уровня меньше, чем нижнего.

В газовых лазерах в качестве активной среды могут использоваться нейтральные атомы в виде газа или пара. Лазеры на нейтральных атомах составляют широкий класс, который включает в себя, в частности, лазеры, использующие почти все инертные газы (He, Ne, Kr, Ar, Xe). Все лазеры на нейтральных атомах инертных газов генерируют в ИК-Диапазоне (1-10 мкм), за замечательным исключением He-Ne-лазера, излучающего в зеленой и красной областях. Большой класс лазеров составляют также лазеры на парах металлов, таких как Pb, Cu, Au, Ca, Sr и Mn. Эти лазеры, как правило, работают в видимой области. Наибольшее значение среди них приобрел лазер на парах меди, генерирующий на зеленом ($\lambda = 510,5 \text{ нм}$) и

желтом ($\lambda = 578,2$ нм) переходах. Все лазеры на парах металлов являются самоограниченными, и поэтому работают в импульсном режиме.

В CO_2 -лазере используется специальная смесь газов CO_2 , N_2 и He . Генерация происходит на переходе между двумя колебательными уровнями молекулы CO_2 , а азот и гелий значительно повышают КПД лазера. CO_2 -лазер является одним из самых мощных лазеров, работающих в непрерывном режиме генерации излучения (от газодинамического CO_2 -лазера получены выходные мощности порядка 80 кВт), и одним из наиболее эффективных (дифференциальный КПД 15-20 %). Лишь полупроводниковые и CO -лазеры имеют более высокие КПД.

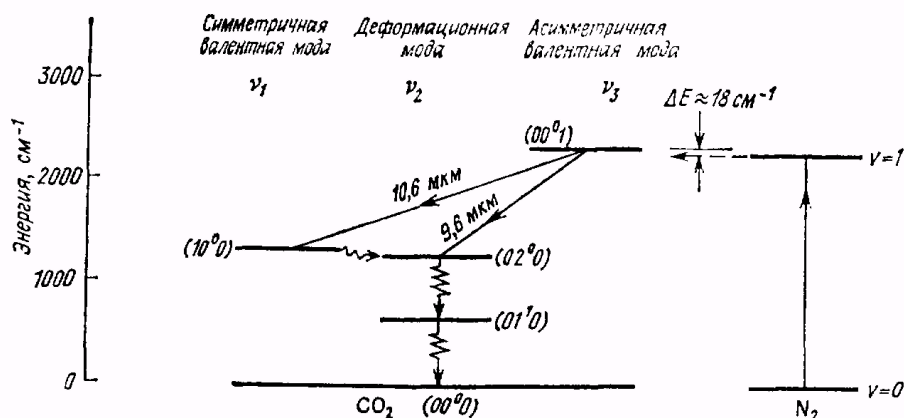


Рис. 1.15. Нижние колебательные уровни основного электронного состояния молекул N_2 и CO_2

На рис. 1.15 приведены схемы энергетических уровней основных электронных состояний молекул CO_2 и N_2 . Поскольку N_2 — двухатомная молекула, она имеет лишь одну колебательную моду; на рисунке показаны два нижних уровня ($n = 0, n = 1$). Структура энергетических уровней молекулы CO_2 более сложная, поскольку эта молекула является трехатомной. Здесь мы имеем три невырожденные колебательные моды, а именно: 1) симметричную валентную моду, 2) деформационную моду и 3) асимметричную валентную моду. Поэтому колебания молекулы описываются тремя кванто-

выми числами n_1 , n_2 и n_3 , которые определяют число квантов в каждой колебательной моде. Таким образом, соответствующий уровень обозначается этими тремя квантовыми числами, записываемыми в последовательности n_1, n_2, n_3 . Например, уровень 01^10 соответствует колебанию, деформационная мода (мода 2) которого имеет один колебательный квант. Поскольку из трех типов колебаний моде 2 соответствует наименьшая постоянная упругости (колебания являются поперечными), рассматриваемый уровень имеет наименьшую энергию. Генерация происходит на переходе между уровнями 00^01 и 10^00 ($\lambda = 10,6$ мкм), хотя можно получить генерацию также и на переходе между уровнями 00^01 и 02^00 ($\lambda = 9,6$ мкм).

С точки зрения конструкции СО₂-лазеры можно подразделить на семь типов: 1) лазеры с медленной продольной прокачкой; 2) лазеры с быстрой продольной прокачкой; 3) отпаянные лазеры; 4) волноводные лазеры; 5) лазеры с поперечной прокачкой; 6) лазеры с поперечным возбуждением при атмосферном давлении (ТЕА-лазеры) и 7) газодинамические лазеры. Следует указать на то, что, хотя они и отличаются друг от друга по многим своим рабочим параметрам (например, выходной мощности), все они имеют общую важную особенность, а именно высокий дифференциальный КПД (15-25%). Столь высокий КПД является следствием большого квантового выхода (40%) и очень высокоэффективного процесса накачки, который имеет место в СО₂-лазере при оптимальной электронной температуре разряда.

К настоящему времени СО₂-лазеры являются основным инструментальным средством лазерной обработки материалов: лазерная резка, прошивка отверстий, термообработка, спекание порошков и многое другое.

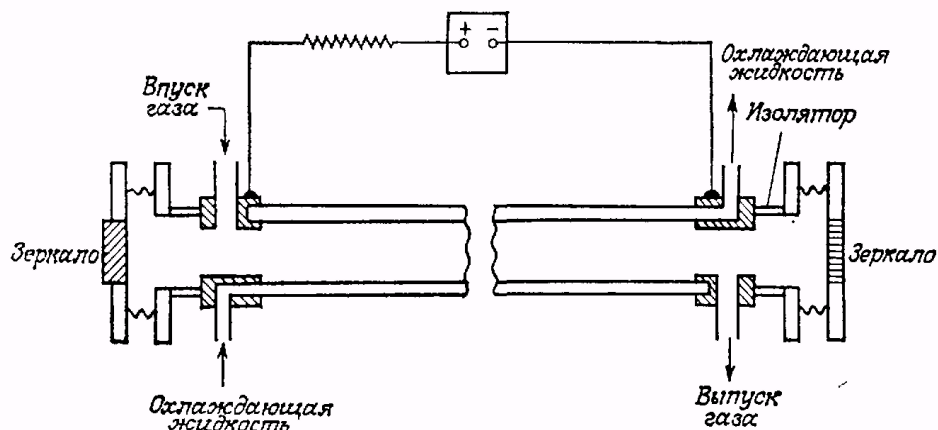


Рис. 1.16. Схематическое представление волноводного CO_2 -лазера с продольной прокачкой газа

1.8.5. Химические лазеры

Л. С. Polanyi первый в 1960 году предложил конструкцию химического лазера благодаря пониманию того, что выделяемая энергия многих химических реакций может переходить в энергию, приходящуюся на колебательные степени свободы. Механизм накачки, используемый в лазере на HF , связан с так называемой холодной реакцией:



Поскольку выделяемая в реакции теплота составляет 31,6 ккал/моль, молекула HF может оказаться в возбужденном состоянии вплоть до колебательного уровня $v = 3$ (рис. 1.17).

Вследствие того, что времена релаксации с различных колебательных уровней отличаются, уровень $v = 2$ обладает самой большой населенностью, и на переходе $v = 2 \rightarrow v = 1$ образуется большая инверсия населенностей. Необходимо отметить, что на колебательные степени свободы приходится более 60% энергии реакции, это приводит к возможности генерации экстремально высокой мощности излучения.

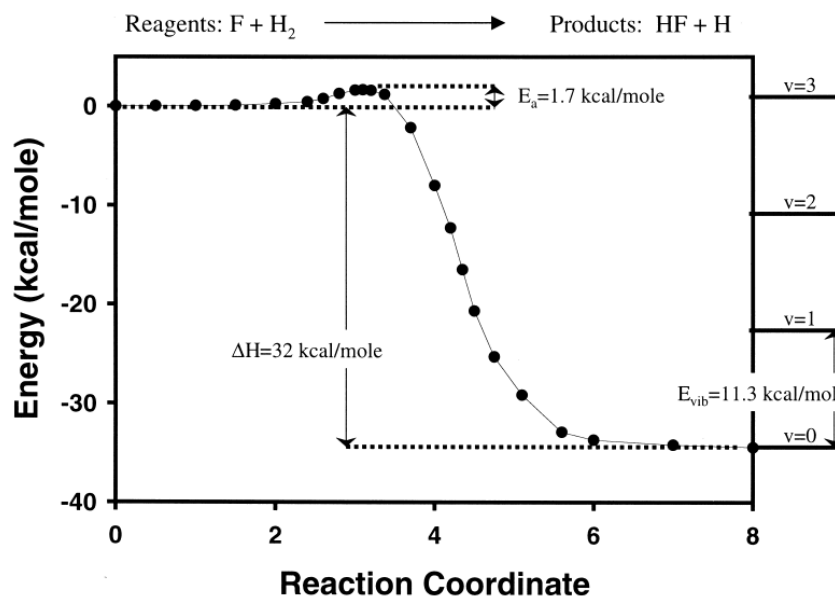


Рис. 1.17. Реакция атомарного фтора с молекулярным водородом производит колебательно возбужденный фтористый водород. Координаты реакции представляют собой нарушение молекулярной водородной связи

Первый химический лазер был продемонстрирован в 1965 г. Каспером и Пиментелом. К 1967 г. были разработаны лазеры на основе реакции атомарного фтора с молекулярным водородом и других молекул. Дальнейшее развитие химических лазеров происходило очень быстро, и 1984 г. был создан HF-лазер мощностью, превышающей 1 МВт. HF-лазер работает в инфракрасном диапазоне электромагнитного спектра с длиной волны около 2,7 мкм. Химический лазер применяется в военной технике и везде, где необходима высокая мощность излучения.

1.8.6. Лазеры на центрах окраски

Центры окраски являются простыми точечными дефектами в кристаллических решетках, состоящими из одного или нескольких электронов, захваченных на ионных вакансиях кристаллической решетки. Эти точечные дефекты часто встречаются во многих кристаллических твердых телах, и

были достаточно широко изучены в щелочногалоидных кристаллах (например, NaCl, KCl и т.д., см. рис. 1.18).

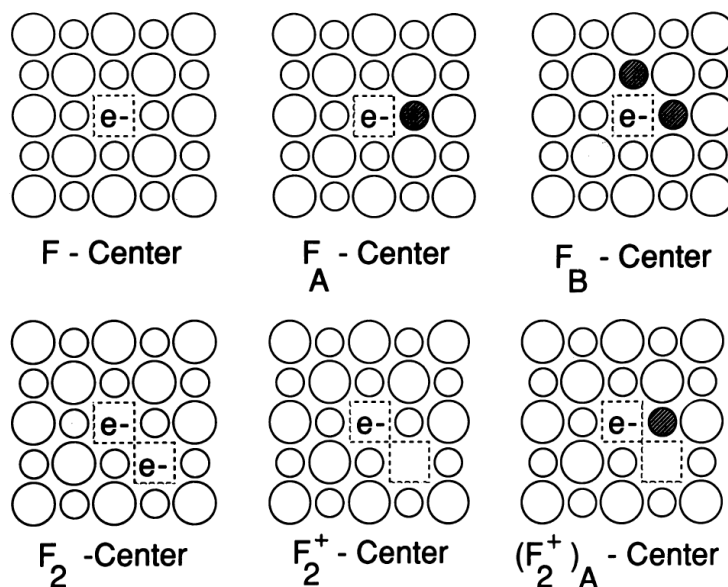


Рис. 1.18. Центры окраски в щелочногалоидных кристаллах

Лазеры на основе центров окраски накачиваются в оптическом диапазоне. Конструкция резонатора с органическими лазерами на красителях может генерировать сверхкороткие импульсы. Уникальная особенность лазеров на цвете заключается в возможности преобразования частоты излучения. Правильно спроектированный лазер обеспечивает настройку в диапазоне, превышающем 25% центральной длины волны. В настоящее время благодаря использованию различных типов центров и принимающих решеток покрывается весь диапазон излучения от 0,8 до 4,0 мкм. Переключаемое когерентное излучение в этой области длин волн имеет важное значение для исследований в оптической связи, сверхбыстрых процессов в полупроводниках, а также в молекулярной спектроскопии с высоким разрешением.

Лазерно-активные центры окраски обладают двумя характеристиками, идеально подходящими для эффективного использования во многих технологических процессах. Во-первых, полосы их поглощения и излучения

однородно уширены: все возбужденные центры могут накачиваться одной линией в спектре поглощения. Однородное уширение позволяет эффективно генерировать излучение в одномодовом режиме по всему диапазону настройки лазера. Во-вторых, большинство переходов, участвующих в лазерной генерации, полностью разрешены. Такие преимущества приводят к большому оптическому усилению и способности генерировать ультракороткие импульсы (продолжительностью $< 10^{-13}$ с). Усиление за один проход на единицу длины активной среды, содержащей типичную плотность центров окраски, может превышать 50%. Такое усиление почти на два порядка больше, чем было получено в твердотельных лазерах. Конкретный пример конструкции лазера на центрах окраски приведён на рис. 1.19.

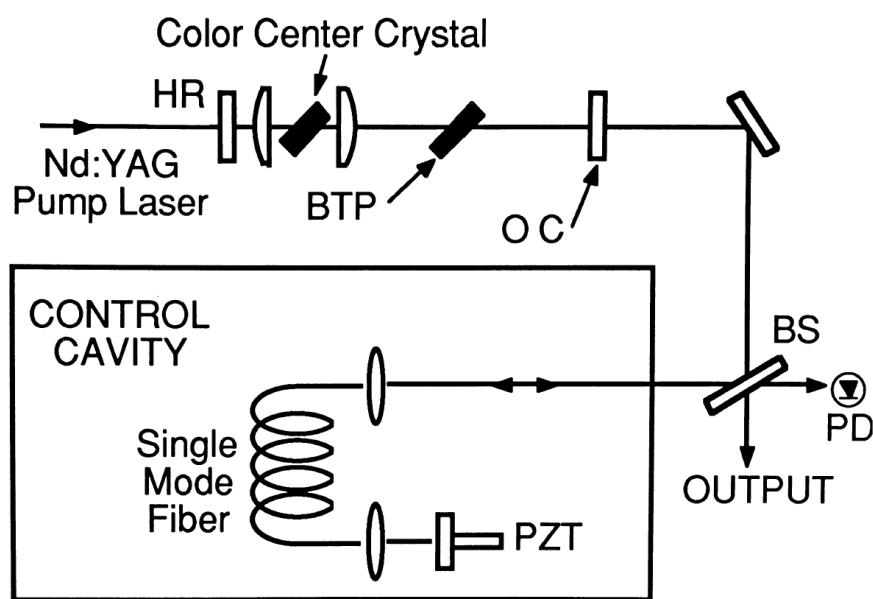


Рис. 1.19. Импульсный лазер на центрах окраски. Выход излучения соединен с оптическим волокном. Синхронно-фазовая модуляция в волокне добавляет полосу пропускания для импульса, который возвращается назад. Такое сочетание позволяет получать фемтосекундные импульсы: ОС — выход соединения; BS — светоделитель; ВТР — модулятор добротности на двупреломлении; HR — зеркало с $R = 1$, PZT — пьезопреобразователь

Лазеры на центрах окраски могут работать как в импульсном или непрерывном режиме, так и в режиме модуляции добротности. В непрерывном режиме выходная мощность более 5 Вт была достигнута в некоторых кристаллах. В импульсном режиме была достигнута мощность 100 мВт на длине волны около 950 нм. Лазеры на красителях обладают исключительной монохроматичностью. В одномодовом непрерывном режиме достигнута ширина линий ниже 4 кГц. Такие монохроматичные волны в сочетании с широкой возможностью настройки частоты волны сделали лазер на центрах окраски мощным инструментом для спектроскопии и метрологии. Это, пожалуй, самый зрелищный способ синхронизации лазерного излучения. Пользуясь широкой полосой пропускания излучения, излучение лазера может быть преобразовано в импульсы длительностью пико- и фемтосекунды. Такие короткие импульсы очень полезны для исследования сверхбыстрых явлений в полупроводниковых материалах и нелинейных характеристик оптических волокон.

Лазерно-активные центры окраски, как правило, устойчивы только при охлаждении до криогенных температур. Хотя некоторые типы центров позволяют непродолжительное время генерировать в импульсном режиме при комнатной температуре, обычно происходит выцветание мощности. При комнатной температуре центры или термически диссоциируют, или диффундируют и взаимодействуют с другими дефектами. Термическая диссоциация может быть минимизирована или устранена при пониженных температурах, поэтому кристаллы, как правило, работают при температуре жидкого азота (77 К).

1.8.7. Лазеры на красителях (жидкостные лазеры)

В данном разделе мы рассмотрим жидкостные лазеры, в которых активная среда представляет собой растворы определенных соединений ор-

ганических красителей в жидком растворителе, таком, как этиловый спирт, метиловый спирт или вода. Органические красители составляют большой класс многоатомных молекул с сопряженными двойными связями. Лазерные красители обычно принадлежат к одному из следующих классов: 1) полиметиновые красители, обеспечивающие генерацию в красной или ближней ИК-области (0,7-1,5 мкм); 3,3'-диэтилтиатрикарбоцианиниодида, которые генерирует в ИК-диапазоне ($\lambda = 810$ нм); 2) ксантеновые красители, генерирующие в видимой области (в качестве примера на рис. 1.20 показана химическая структура широко используемого красителя родамина 6G $\lambda = 590$ нм); 3) кумариновые красители, генерирующие в сине-зеленой области (400-500 нм); 4) сцинтилляторные красители, генерирующие в УФ-диапазоне ($\lambda < 400$ нм).

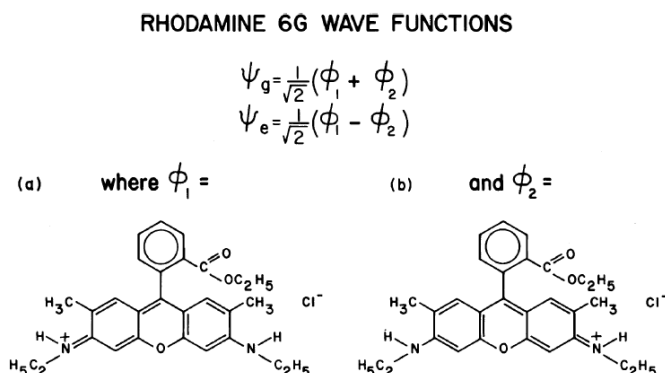


Рис. 1.20. Химические символы 2 “резонансных” форм структуры родамина 6G — молекулы красителя и волновые функции, соответствующих резонансных состояний

Лазеры на красителях работают либо в импульсном, либо в непрерывном режиме. Лазерная генерация в импульсном режиме получена на большом числе различных красителей, причем для накачки применялись как импульсная лампа с коротким импульсом (при длительности переднего фронта < 1 мкс), так и лазер, генерирующий короткие световые импульсы. В обоих случаях короткие импульсы необходимы для того, чтобы обеспечить

генерацию до того, как в триплетном состоянии накопится существенная населенность, и до появления градиентов показателя преломления в жидкости. При накачке импульсной лампой можно применять эллиптический осветитель или осветитель с плотной упаковкой. Чтобы обеспечить лучшую однородность накачки, а отсюда и более симметричные градиенты показателя преломления, применяют также и спиральные лампы. Для лазерной накачки часто применяют азотный лазер, УФ-излучение которого подходит для накачки многих красителей, генерирующих в видимой области спектра. Для получения больших энергий и средних выходных мощностей для накачки УФ-излучением все чаще применяют более эффективные эксимерные лазеры (в частности, KrF и XeF), в то время как для красителей с длиной волны излучения более чем 550 – 600 нм предпочитают использовать вторую гармонику Nd : YAG-лазера в режиме модуляции добротности ($\lambda = 532$ нм), а также зеленое или желтое излучение лазера на парах меди.

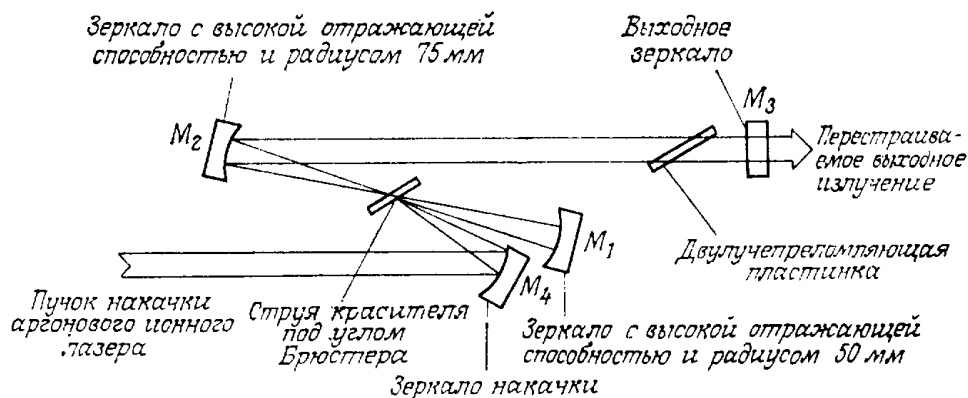


Рис. 1.21. Устройство непрерывного лазера на красителе с накачкой аргоновым лазером

1.8.8. Эксимерные лазеры

Эксимерные лазеры представляют собой интересный и важный класс молекулярных лазеров на переходах между различными электронными со-

стояниями. Рассмотрим двухатомную молекулу A_2 , кривые потенциальной энергии для основного и возбужденного состояний которой приведены на рис. 1.22. Поскольку основное состояние соответствует взаимному отталкиванию атомов, в этом состоянии молекула не существует (т. е. в основном состоянии частицы существуют лишь в мономерной форме A). Однако, поскольку кривая потенциальной энергии возбужденного состояния имеет минимум, молекула A_2 может существовать в возбужденном состоянии (т. е. в возбужденном состоянии частицы существуют в димерной форме A_2). Такая молекула A^* называется эксимером (аббревиатура англ. слов *excited dimer* — возбужденный димер). Предположим теперь, что в некотором объеме каким-либо образом создано большое число эксимеров. Тогда генерация может быть получена на переходе между верхним (связанным) и нижним (свободным) состояниями (связанно-свободный переход). Соответствующий лазер называется эксимерным. Эти лазеры характеризуются двумя необычными, но важными свойствами благодаря тому, что основное состояние соответствует взаимному отталкиванию атомов. 1) Как только в результате генерации молекула перейдет в основное состояние, она немедленно диссоциирует. Это означает, что нижний лазерный уровень будет всегда пустым. 2) Не существует четко выраженных вращательно-колебательных переходов, и переход является относительно широкополосным ($20\text{--}100\text{см}^{-1}$). Однако следует заметить, что в некоторых эксимерных лазерах кривая потенциальной энергии основного состояния не соответствует чистому взаимному отталкиванию, а обладает неглубоким минимумом. В этом случае переход происходит между верхним связанным состоянием и нижним (слабо) связанным состоянием (связанно-связанный переход). Однако, поскольку основное состояние является лишь слабосвязанным, молекула в этом состоянии претерпевает быструю диссоциацию либо

сама (преддиссоциация), либо вследствие первого же столкновения с другой молекулой газовой смеси.

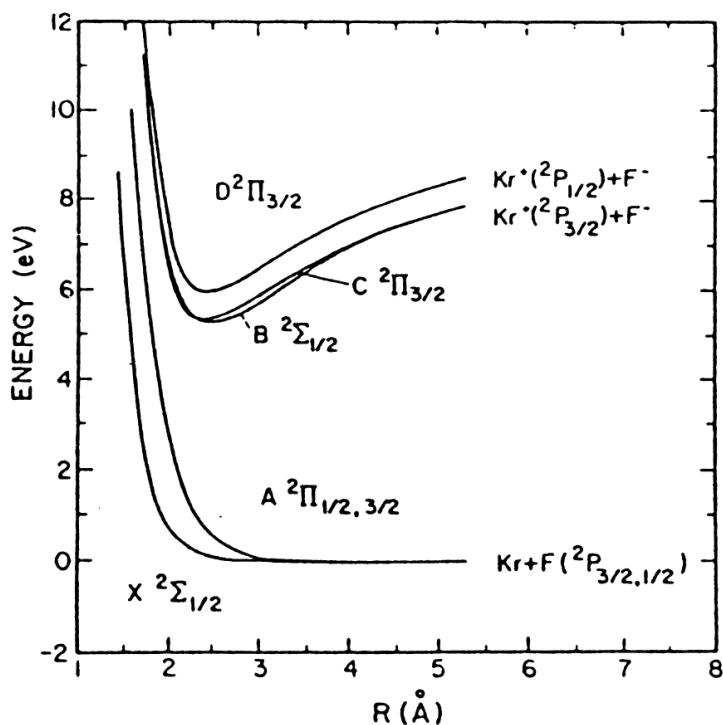


Рис. 1.22. Потенциальные диаграммы инертного газа криптона (внизу) и эксимера (вверху)

Рассмотрим теперь наиболее интересный класс эксимерных лазеров, в которых атом инертного газа (например, Ar, Kr, Xe) в возбужденном состоянии соединяется с атомом галогена (например, F, Cl), что приводит к образованию эксимера галогенидов инертных газов. В качестве конкретных примеров укажем ArF ($\lambda = 193$ нм), KrF ($\lambda = 248$ нм), XeCl ($\lambda = 309$ нм) и XeF ($\lambda = 351$ нм), которые генерируют в УФ-диапазоне. То, почему галогениды инертных газов легко образуются в возбужденном состоянии, становится ясным, если учесть, что в возбужденном состоянии атомы инертных газов становятся химически сходными с атомами щелочных металлов, которые, как известно, легко вступают в реакцию с галогенами. Эта аналогия указывает также на то, что в возбужденном состоянии связь имеет ионный характер: в процессе образования связи возбужденный электрон перехо-

дит от атома инертного газа к атому галогена. Поэтому подобное связанное состояние также называют состоянием с переносом заряда. Рассмотрим теперь подробнее KrF-лазер, так как он представляет собой один из наиболее важных лазеров данной категории. На рис. 1.22 приведена диаграмма потенциальной энергии молекулы KrF. Верхний лазерный уровень является состоянием с переносом заряда и ионной связью, которое при $R \rightarrow \infty$ отвечает состоянию 2P положительного иона Kr и состоянию 1S отрицательного иона F. Поэтому энергия при $R \rightarrow \infty$ равна потенциалу ионизации атома криптона минус сродство атома фтора к электрону. При больших межъядерных расстояниях кривая энергии подчиняется закону Кулона. Таким образом, потенциал взаимодействия между двумя ионами простирается на гораздо большее расстояние (5–10 Å), чем в случае, когда преобладает ковалентное взаимодействие. Таким образом, в основном состоянии атомные состояния инертного газа и галогена меняются местами. В результате взаимодействия соответствующих орбиталей верхнее и нижнее состояния при малых межъядерных расстояниях расщепляются на состояния $^2\Sigma$ и $^2\Pi$. Генерация происходит на переходе $^2\Sigma \rightarrow ^2\Sigma$, поскольку он имеет наибольшее сечение. Заметим, что при переходе излучающий электрон передается от иона F^- иону Kr^+ .

Эксимерные лазеры используются для очень точного травления различных материалов в приложениях, связанных с электронными печатными схемами (стереофотолитография), а также для выжигания тканей в биологии и медицине (например, радиальная кератомия радужной оболочки глаза). Эксимерные лазеры также широко используются в научных исследованиях и, по-видимому, найдут многочисленные применения там, где требуется источник мощного УФ-излучения с высоким КПД (например, в фотохимии). Эксимерные лазеры обладают наибольшей пиковой мощно-

стью. Достигнуто значение мощности $\sim 1\text{ТВт}$ при длительности импульса в несколько фемтосекунд.

1.8.9. Лазеры на свободных электронах

Лазеры на свободных электронах впервые были разработаны почти 5 десятилетий назад и к настоящему времени позволяют генерировать перенастраиваемое лазерное излучение в диапазоне от микроволн до ультрафиолета. В таких лазерах свободные электроны высокой энергии, полученные в ускорителях элементарных частиц, испускают когерентное излучение. Поскольку электроны представляют поток свободно движущихся частиц, длина волны генерируемого излучения не ограничена, в отличие от связанных электронов в атомах и молекулах при переходе между двумя дискретными энергетическими уровнями. Процесс генерации излучения свободными электронами может быть описан классической электромагнитной теорией.

Излучение создается при взаимодействии между тремя элементами: электронного пучка и электромагнитной волны бегущих в одном направлении и периодического магнитного поля, создаваемого системой магнитов, известных как ондулятор. Схематическое изображение системы из этих трех элементов показано на рис. 1.23 для плоской геометрии ондулятора. Ондулятор магнитного поля действует на электроны таким образом, что они приобретают волнообразное движение. Ускорение, связанное с этой криволинейной траекторией, согласно законам классической электродинамики формирует электромагнитное излучение. В этом процессе электроны теряют энергию на излучение электромагнитной волны, которая усиливается и излучается лазером. Широкий диапазон настройки лазера на свободных электронах возможен потому, что длина волны генерируемого излучения определяется как периодичностью поля в ондуляторе, так и энергией электронного пучка.

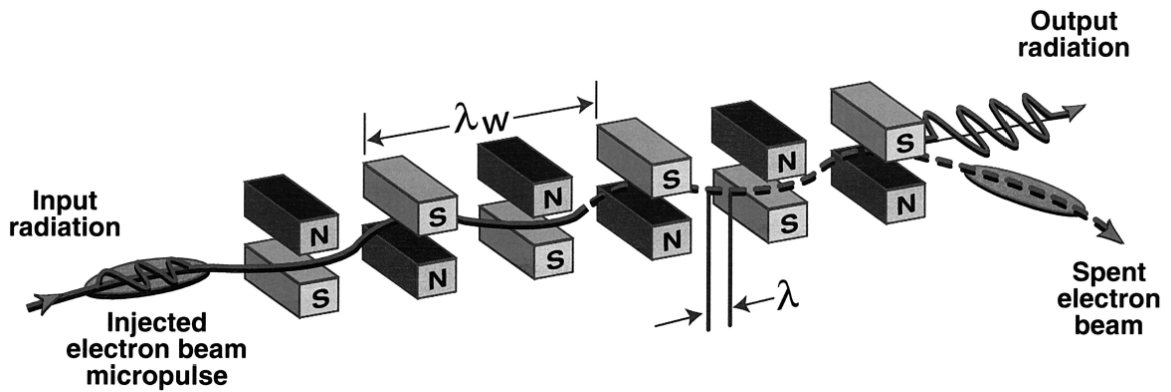


Рис. 1.23. Схематическое изображение взаимодействия между электронным пучком и электромагнитным полем, формируемым плоским ондулятором [5]

1.8.10. Рентгеновские лазеры

Достижение когерентной генерации в рентгеновском диапазоне долгое время было желанной мечтой, которая медленно, но верно воплощается в жизнь. Действительно, потенциальные приложения рентгеновских лазеров крайне важны — они включают такие возможности, как рентгеновская голография клеток или их частей, с помощью которой можно получать трехмерные изображения с разрешением в несколько ангстрем, и рентгеновская литография полупроводниковых приборов, которая позволила бы получать изображения с предельно высоким разрешением.

Прежде чем обсуждать то, что было достигнуто в этом диапазоне длин волн, укажем на те трудности, которые необходимо преодолеть для получения генерации в рентгеновском лазере. Обращаясь к основным принципам, заметим, что пороговая мощность накачки четырехуровневого лазера в единичном объеме дается выражением

$$\frac{dP_{por}}{dV} = \frac{h\nu_\rho}{\eta_\rho} \frac{\gamma}{\sigma l \tau} \quad (1.16)$$

В то же время известно, что $1/(\sigma\tau) \sim \nu_0^2 g_t(0) \sim \nu_0^2 \Delta\nu_0$. На частотах УФ- и ВУФ-диапазонов при умеренных давлениях можно считать, что ширина

линии $\Delta\nu_0$ определяется доплеровским уширением. Следовательно, $\Delta\nu_0 \propto \nu_0$, поэтому dP_{por}/dV увеличивается как ν_0^4 (если положить $\nu_p \approx \nu_0$). При более высоких частотах, соответствующих рентгеновскому диапазону, ширина линии определяется естественным уширением, так как излучательное время жизни становится очень коротким (порядка фемтосекунд). В этом случае $\Delta\nu_0 \sim \nu_0^3$ и dP_{por}/dV увеличивается как ν^6 . Таким образом, если мы, к примеру, перейдем из зеленой области ($\lambda = 500$ нм) всего лишь в мягкий рентген ($\lambda = 10$ нм), то длина волны уменьшится в 50 раз, а dP_{por}/dV увеличится на много порядков! С практической точки зрения заметим, что многослойные диэлектрические зеркала в рентгеновской области обладают большими потерями и трудны в изготовлении. Основная проблема состоит в том, что в этом диапазоне разница в показателях преломления различных материалов оказывается очень малой. Поэтому для получения приемлемых коэффициентов отражения необходимо использовать большое число (сотни) диэлектрических слоев, а рассеяние света на столь большом числе поверхностей раздела приводит к очень большим потерям. Поэтому до сих пор рентгеновские лазеры работают без зеркал в режиме УСИ (усиленное спонтанное излучение).

К настоящему моменту наилучшие результаты получены при использовании мощного пучка второй гармоники ($\lambda = 0,53$ мкм) от лазера Novette, одной из составляющих лазерной установки Nova в Ливерморской лаборатории им. Лоуренса в США. Пучок фокусируется в узкую линию ($d \approx 200$ мкм, $l = 1,2$ см) на тонкую (75 нм) полосу селена, нанесенную путем испарения на фольгу из формвара толщиной 150 нм (рис. 1.24). Фольгу можно облучать с одной или с обеих сторон. Благодаря высокой интенсивности этого накачивающего пучка ($\sim 5 - 10^{13}$ Вт/см²) фольга взрывается и возникает плазма высокоионизованного Se, имеющая форму почти цилиндра диаметром $d = 200$ мкм. Особенностью этой плазмы является наличие в

ней 24-кратно ионизованного Se, обладающего, как и нейтральный Ne, основной электронной конфигурацией $1s^2 2s^2 2p^6$ (неоноподобный селен), которая является особенно устойчивой. Вынужденное излучение наблюдается на двух линиях ($\lambda = 20,63$ и $\lambda = 20,96$ нм) перехода $2p^5 3p \rightarrow 2p^5 3s$. Благодаря значительно большему заряду ядра Se по сравнению с Ne эти линии попадают в область от дальнего УФ диапазона до мягкого рентгена. Возбуждение из основного состояния в состояние $2p^5 3p$ происходит вследствие неупругих столкновений с электронами плазмы. Инверсия населенностей достигается благодаря тому, что время перехода $2p^5 3s$ в основное состояние (этот переход электродипольно разрешен) намного меньше времени жизни $3p$ -состояния.

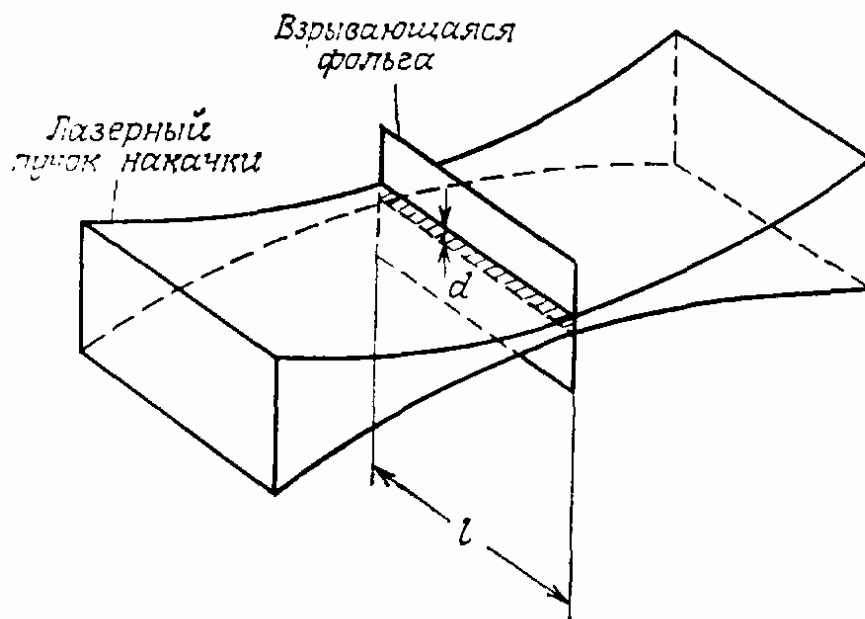


Рис. 1.24. Геометрия мягкого рентгеновского лазера с поперечным освещением, использующего метод взрывающейся фольги

1.9. Воздействие лазерного излучения на вещество

Известно несколько монографий, посвященных описанию процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом. Для получения дополнительной подробной информации рекомендуется использовать конспект лекций [7], подготовленный группой авторов Либенсоном М.Н., Яковлевым Е.Б. и Шандыбиной Г.Д. под общей редакцией заслуженного деятеля науки России, Лауреата Государственной Премии СССР, д.т.н., профессора В.П. Вейко. Указанная работа посвящена детальному описанию процессов, возникающих при лазерном воздействии на вещество: поглощение, рассеяние и дисперсия световых волн, нелинейная оптика и изменение оптических свойств материалов. Для целей настоящего курса необходимо понимание явлений, возникающих при поглощении излучения металлами, и их оптических свойств.

1.9.1. Взаимодействие излучения с непрозрачными твердыми телами

При описании процесса воздействия лазерного излучения на твердые непрозрачные тела (металлы, полупроводники, диэлектрики) можно выделить три стадии: нагревание без фазовых переходов; плавление и испарение; ионизация испаряемого вещества и образование плазмы. Простейший способ описания воздействия лазерного излучения — описание отдельных стадий. Полученные результаты могут быть использованы для описания более сложного случая, когда эти стадии нельзя четко разделить.

Рассмотрим нагревание без изменения фазового состояния. Основные явления в этом случае заключаются в отражении и поглощении излучения поверхностью, распространении тепла вглубь среды за счет теплопроводности. Основные закономерности, характеризующие процесс взаимодействия света с поверхностью твердого непрозрачного тела, хорошо известны

из курса оптики. Световая волна, падающая на поверхность, взаимодействует с электронами, возбуждая их колебания. Вынужденные колебания электронов приводят к возникновению отраженной волны. Если электроны в твердом теле полностью свободны, то излучение полностью отражается, поглощение отсутствует. Если электроны частично связаны, то часть энергии падающей волны передается твердому телу, вызывая его нагревание. Весь процесс взаимодействия света с электронами происходит в очень тонком поверхностном слое (скин-слое), так что можно говорить о взаимодействии электромагнитного излучения с поверхностью твердого тела.

Заряженные частицы вырываются из поверхности непосредственно под действием света за счет фотоэффекта. Прежде чем перейти к рассмотрению этих процессов, необходимо сделать несколько общих замечаний о том, что представляет собой поверхность твердого тела. Наиболее важным свойством практически любой поверхности является ее неоднородность. Поверхность идеального кристалла на практике является идеализацией, никогда не реализующейся на достаточно большой площади. На самом деле идеальная поверхность всегда искажена физическими, химическими и индуцированными неоднородностями.

Физические неоднородности поверхности заключаются, во-первых, в нарушении кристаллической решетки (в смещении атомов из узлов, т. е. дефектах Френкеля и Шоттки) и образовании вакансий, что влияет на адсорбционную способность поверхности. Вторым типом неоднородности — блочность макроскопического образца, обуславливающая наличие дислокаций. В частности, различным образом могут быть ориентированы различные грани микроскопических монокристаллов, составляющих макроскопический поликристалл. Эти факторы влияют на работу выхода из поверхности.

Химическая неоднородность поверхности — это дефекты, обусловленные примесями, всегда имеющимися в сколь угодно чистом веществе по технологическим причинам. Индуцированная неоднородность поверхности обусловлена адсорбцией поверхностью различных нейтральных (атомы, молекулы) и заряженных (ионы) частиц из окружающего газа (воздуха). Наличие посторонних частиц, адсорбированных поверхностью, приводит к изменению работы выхода из поверхности. Наконец, большое значение имеет в ряде случаев качество обработки поверхности (например, для металлов).

Макроскопически шероховатая поверхность представляет собой большое число микроскопических участков, ориентированных под разными углами к направлению падения световой волны, а поэтому характеризуемых различным значением коэффициента отражения. Резюмируя, надо иметь в виду, что любой макроскопический участок поверхности твердого тела характеризуется некоторыми средними значениями коэффициента отражения и работы выхода, существенно зависящими от неоднородности поверхности.

В дальнейшем основное внимание будет уделено металлам, как по той причине, что для металлов наиболее хорошо развиты необходимые методы теоретического описания воздействия лазерного излучения, так и потому, что для практики данного учебного курса металлы являются наиболее важным объектом.

1.9.2. Скин-слой и оптические свойства металлов

В инфракрасной и видимой области оптического диапазона металлы сильно отражают падающее излучение. Интенсивное рассеяние света происходит в результате его взаимодействия со свободными электронами в металлах, концентрация которых достигает $10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Колебания

электронов создают вторичные волны, которые формируют сильную отраженную волну. Поглощение квантов света непосредственно электронами проводимости возможно только при их одновременных столкновениях с фонами, примесями, друг с другом, поверхностью металла, границами зерен и кристаллитов. Столкновения и формирование из рассеянного света отраженной волны происходит в тонком приповерхностном слое (скин-слой толщиной $\delta_s \ll 1$ мкм), в котором затухает проникающее в металл излучение.

Распространение электромагнитных волн в однородной и изотропной среде, обладающей проводимостью, можно исследовать с помощью уравнений Максвелла. При этом необходимо учесть, что внутри однородного проводника электрическое поле отсутствует. Для электрически нейтральных сред ($\text{div} \vec{E} = 0$) уравнения Максвелла можно преобразовать к виду

$$\nabla^2 \vec{E} - \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0, \quad (1.17)$$

$$\nabla^2 \vec{H} - \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = 0. \quad (1.18)$$

Уравнения типа (1.17) называются телеграфными уравнениями. Решение этих уравнений для плоской электромагнитной волны, распространяющихся в положительном направлении оси x , запишем в виде

$$E = E_0 \exp(-k_i x) \exp(i(kx - \omega t)), \quad (1.19)$$

$$H = H_0 \exp(-k_i x) \exp(i(kx - \omega t)), \quad (1.20)$$

Здесь учтено, что для проводящей среды волновое число следует заменить комплексным волновым числом:

$$k^2(\omega) = \omega^2 \epsilon \mu - i\omega \sigma \mu = (k - ik_i). \quad (1.21)$$

Из (1.19) следует, что по мере проникновения вглубь проводника амплитуды векторов убывают по экспоненциальному закону. Поэтому основная часть электрического поля сосредоточена у поверхности проводника (в

скин-слое), толщина которого равна $\delta_s = l/k_i$. Электропроводность металлов велика, поэтому для оптического и ИК-диапазона выражение для δ_s примет вид

$$\delta_s = \sqrt{\frac{2}{\sigma\omega\mu}} = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi\sigma}} \sqrt[4]{\frac{\varepsilon}{\mu}}. \quad (1.22)$$

Для меди $\sigma = 5,14 \cdot 10^7$ ом/м. Для световых волн ($\lambda = 1$ мкм) глубина проникновения $\delta_s = 4$ нм, т.е. говорить о распространении света в проводнике не имеет смысла.

Коэффициент R отражения электромагнитных волн поверхностью вещества и коэффициент пропускания T можно определить как отношение плотностей потока отраженной и проходящих волн. При учете поглощения энергии в скин-слое можно получить уравнение

$$T + R + A = 1, \quad (1.23)$$

где A — поглощательная способность вещества.

Любое известное соотношение оптики диэлектриков может быть формально перенесено в оптику металлов либо других поглощающих сред простой заменой вещественных величин показателя преломления n и волнового вектора k на комплексные аналоги \tilde{n} и \tilde{k} соответственно, причем

$$\tilde{n} = n - ik_p, \quad (1.24)$$

$$\tilde{k} = k - ik_i. \quad (1.25)$$

Для металлов k_p в видимой области спектра обычно порядка единицы. Например, для золота при нормальном падении электромагнитной волны на поверхность $k_p = 2,82$.

Отраженные и поглощенные электромагнитные волны возникают вследствие процессов, протекающих не на границе раздела, а в внутри металла. При этом для непрозрачных твердых тел доля падающего монохроматического излучения, поглощенного телом, определяется его поглоща-

тельной способностью, тогда для случая нормального падения

$$A = 1 - R = \frac{4n}{(n + 1)^2 + k_p^2}. \quad (1.26)$$

Таким образом A можно вычислить по данным измерений оптических постоянных или комплексного показателя преломления.

В таблице 1.9.2 приведены значения величин n , k_p и R при комнатной температуре для некоторых металлов в видимой и ИК-области.

Таблица 1.1. Оптические постоянные некоторых металлов

	$\lambda = 0,5 \text{ мкм}$			$\lambda = 5,0 \text{ мкм}$		
	n	k_p	$R, \%$	n	k_p	$R, \%$
Cu	1,06	2,70	63,2	3,1	32,8	98,9
Ag	0,11	2,94	95,5	2,4	34,2	99,2
Au	0,50	2,04	68,8	3,3	35,2	98,95
Zn	-	-	-	3,8	26,2	97,9
Al	0,50	4,59	91,4	6,7	37,6	98,2
In	-	-	-	9,8	32,2	96,6
Sn	0,78	3,58	80,5	8,5	28,5	96,2
Pb	1,70	3,30	62,6	9,0	24,8	95,0
Ti	2,10	2,82	52,5	3,4	9,4	87,4
Nb	2,13	3,07	56,0	8,0	27,7	96,2
V	2,65	3,33	56,6	6,6	17,5	92,7
Mo	3,15	3,73	59,5	4,25	23,9	97,2
W	3,33	2,96	51,6	3,48	21,2	97,0
Fe	1,46	3,17	63,7	4,2	12,5	90,8
Co	1,56	3,43	65,9	4,3	14,6	92,9
Ni	1,54	3,10	61,6	4,95	18,5	94,8
Pt	1,76	3,59	65,7	7,7	20,2	93,7

Вследствие того, что излучение поглощается тонким приповерхностным слоем материала, для описания взаимодействия лазерного излучения с металлами можно использовать так называемую “тепловую модель”. Согласно этой модели можно рассматривать независимо друг от друга четыре стадии воздействия: поглощение света и переход поглощенной энергии в тепло; нагрев материалов без разрушения; разрушение и разлёт продуктов разрушения; остывание. Тепловая модель позволила успешно описать распространение тепла, плавление, модификацию структуры вещества.

1.9.3. Плавление и испарение металлов

Обратимся теперь к стадии плавления и испарения металлов¹. Нельзя разделять эти процессы, так как упругость насыщенного пара очень быстро растет при незначительном увеличении температуры над температурой плавления. Рассматривая взаимосвязанный процесс плавление — испарение металлов, мы, в соответствии с принятой моделью последовательных стадий, не будем рассматривать процесс ионизации паров, т. е. процесс образования плазмы.

Если стадия нагревания без изменения фазового состояния может быть четко выделена, в особенности при температурах, значительно меньших температуры плавления, то выделить стадию плавления значительно труднее. Дело в том, что в интервале изменения температуры от температуры плавления T_L до температуры кипения T_K очень быстро растет давление равновесного пара. Напомним, что температура кипения — это та температура, при которой давление равновесного пара равно давлению окружающего газа. В качестве типичного количественного примера приведем алюминий, для которого T_L 900 К, T_K 2000 К, а давление насыщенного пара при этом, примерно двукратном, увеличении температуры возрастает на 11 (!)

¹По материалам [8]

порядков, от $p_l \sim 10^{-8}$ Тор до $p_k \sim 10^3$ Тор. Из этого примера видно, что если плавление является пороговым процессом, для реализации которого необходима температура $T > T_L$, то испарение не является пороговым процессом, равновесное давление паров плавно и очень быстро увеличивается при повышении температуры. Поэтому если нужно выделить стадию плавления и имеется возможность пренебречь испарением, то надо нагревать металл до температур, лежащих в очень узком диапазоне над температурой плавления.

Для того чтобы количественно определить параметры лазерного излучения, необходимые для осуществления процесса плавления металлов, надо учитывать соотношения и различные данные, характеризующие процесс плавления. Первое, что необходимо рассмотреть, — это изменения тепловых свойств металлов в твердой и жидкой фазах. Удельная теплоемкость остается практически неизменной, а теплопроводность уменьшается примерно в 2 раза при плавлении металла. Следовательно, оценки по порядку величины могут быть сделаны без учета этих изменений и с использованием данных для твердой фазы. Второе, что необходимо принять во внимание, — это скрытая теплота плавления металлов. Она изменяется на порядок величины при переходе от легкоплавких металлов (например, для свинца примерно равна 10^3 кал/моль) к тугоплавким металлам (например, для вольфрама 10^4 кал/моль). Для того чтобы ощутить роль скрытой теплоты плавления, ее надо сопоставить с тем количеством тепла, которое необходимо для нагревания металла до температуры плавления. Молярная теплоемкость для всех металлов примерно одинакова, c_p 10 кал/(моль К). Поэтому основную роль играет температура плавления, которая различается очень сильно примерно от 300°C для легкоплавких металлов (например, свинец) до 3000°C для тугоплавких (например, вольфрам). Соответственно количество тепла, необходимое для нагревания металла от комнатной температуры

до температуры плавления, также очень сильно различается (примерно от 10^2 кал/моль для свинца до 10^4 кал/моль для вольфрама). Сопоставление этих величин показывает, что роль скрытой теплоты плавления тем больше, чем ниже температура плавления металла.

Наконец, третий фактор, который надо принимать во внимание в наиболее распространенном случае плавления металлов лазерным излучением в воздухе, — это процесс окисления поверхностного слоя и изменение коэффициента отражения излучения, обусловленное окислением.

Строгое описание процесса плавления достаточно сложно, так как оно должно учитывать все упомянутые выше факторы в динамике, с учетом распределения лазерного излучения во времени и продвижения границы между твердой и жидкой фазами вглубь металла при его нагревании. Это так называемая задача Стефана, хорошо известная в математической физике. В общем виде ее решение может быть получено лишь численно, с использованием ЭВМ. Некоторые результаты таких расчетов приведены далее в этом учебном пособии. Плавление металлов лазерным излучением имеет большое значение для практики и современной технологии металлообработки. Однако в условиях практической реализации плавления всегда одновременно реализуется и сильное испарение вещества.

Испарение металлов. Из данных, приведенных выше, следует, что уже при незначительном превышении температуры металла над температурой плавления испарение может быть не пренебрежимо мало, а при достижении температуры кипения давление паров равно давлению окружающего газа. Облако пара, возникающее на пути излучения перед нагреваемой поверхностью, качественно изменяет процесс взаимодействия лазерного излучения с металлом. Во-первых, пары могут эффективно поглощать излучение, экранируя нагреваемую поверхность от источника излучения. Во-вторых, пары могут быть ионизованы под действием излучения, так что

поглощать излучение и экранировать металл будут уже не пары, а плазма. Наконец, в-третьих, в плазменном облаке может возникнуть оптический пробой.

Рассмотрим процесс испарения без учета влияния образующегося пара на процесс распространения излучения от лазера к поверхности металла. Из сказанного выше ясно, что при этом мы будем ограничиваться умеренными интенсивностями излучения. При рассмотрении процесса испарения металлов необходимо с самого начала различать стационарный и нестационарный режимы, реализующиеся при использовании непрерывного и импульсного лазерного излучения. Рассмотрим сначала нестационарный процесс. Зададимся такой интенсивностью излучения I , при которой металл будет нагрет в поглощающем слое до температуры $T > T_P$. Характер процесса испарения зависит при этом от энергии Q и длительности τ действия излучения. Пусть фиксирована энергия Q . Если τ велико, то тепло успевает распространиться за счет теплопроводности на большую глубину, температура не будет велика и соответственно невелико будет количество испарившегося металла. Если τ мало, то температура поверхности металла будет велика, но толщина нагретого слоя мала, что опять означает малое количество испаренного металла. Отсюда очевидно, что эффект испарения будет максимален при некотором среднем значении τ . Между тем, глубина испарения является важной характеристикой для многочисленных практических применений, так как, по сути дела, это глубина, с которой удаляется металл, т. е. глубина отверстия (лунки), которая может быть сделана в металле, или толщина листового металла, в котором может быть сделано сквозное отверстие. Имеются две очевидные возможности увеличения глубины испарения: повышение интенсивности излучения и использование непрерывного излучения. Первая возможность ограничена быстрым испарением и экранировкой металла парами, а вторая — типом используемого лазера, так как

достаточно высокую интенсивность I непрерывного излучения можно получить лишь для отдельных лазеров. При использовании лазерного излучения для решения различных технологических задач используются, как правило, непрерывное инфракрасное излучение CO_2 -лазера и специальные приспособления, позволяющие удалять пары металла и расплав по мере их образования. Если же мощность выбранного лазера невелика (твердотельные, оптоволоконные лазеры), то необходимо использовать режим модуляции добротности для получения низких значений времени импульса τ .

Вопросы для самоподготовки

1. Дискретность энергетических уровней атомов.
2. Обозначение термов атомов.
3. Неопределенность Гейзенберга.
4. Квантовые числа, определяющие состояние атома, электрона.
5. Какие правила отбора устанавливаются для *излучательных* переходов?
6. Для чего используются эллиптические отражатели?
7. Спектры излучения и поглощения оптически прозрачных твердых тел.
8. Колебательные спектры излучения молекул.
9. Уширение спектральных линий.
10. Система уравнений Максвелла.
11. Волновое уравнение. Электромагнитные волны.

Вопросы для самопроверки

1. Какие фундаментальные явления взаимодействия фотонов с веществом используются для генерации лазерного излучения?
2. Запишите выражение, определяющее вероятность спонтанного, вынужденного излучения или поглощения фотона.
3. Какое условие должно выполняться в активной среде для усиления света?
4. Расшифруйте аббревиатуру LASER.
5. Какие существуют схемы создания инверсии заселенности энергетических уровней?
6. Свойства лазерного излучения.
7. Для чего используется режим модуляции добротности?
8. Опишите конструкцию резонатора Фабри-Перо.
9. Какие типы лазеров способны вырабатывать высокую мощность в непрерывном режиме излучения?
10. Что такое центры окраски?
11. В каких лазерах существует возможность перестройки частоты излучения?
12. Какой способ накачки используется в газовых лазерах?
13. Какие лазеры способны осуществлять генерацию в УФ-диапазоне?
14. Какие лазеры обладают наибольшей мощностью в импульсном режиме?

15. Опишите принцип работы оптоволоконного лазера.
16. Объясните, почему полупроводниковые лазеры обладают наибольшей эффективностью.
17. Почему для стереолитографии необходимо использовать лазер с наименьшей длиной волны?
18. Назовите Нобелевских лауреатов в области физики лазеров.
19. На каких активных средах изготавливаются твердотельные лазеры ?
20. Какова толщина скин-слоя для металлов?
21. Почему металлы обладают высокой отражательной способностью?
22. Как коэффициент отражения излучения поверхностью металлов зависит от длины волны лазера?
23. Почему неверно отдельно рассматривать процессы плавления и испарения вещества?

2. ЛАЗЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Особенности лазерного излучения, такие как большая плотность фотонов, высокая плотность энергии, значительное давление света, определили широкое использование лазеров в современных технологиях. Большое количество типов технологического применения лазеров объясняется широким разнообразием процессов, происходящих в телах под действием лазерного излучения:

- Эмиссионные процессы: десорбция молекул; термоэлектронная эмиссия; термоионная эмиссия; эмиссия нейтральных атомов.
- Тепловые процессы: плавление, испарение, рекристаллизация; термообработка (например закалка сталей); аморфизация керамик и тонких металлических пленок; диффузионные процессы; фазовые переходы.
- Поверхностные химические реакции: электрохимическое осаждение, окисление, восстановление, термическое разложение металлоорганик, полимеризация.
- Термомеханические и вольтаические эффекты: тепловое расширение; термоупругие напряжения; генерация ударных волн в твердом теле и в воздухе; генерация ультразвуковых волн в материале под действием импульса; оптический пробой в прозрачных диэлектриках; генерация ЭДС в пленках.

Подробному изложению вопросов современного применения лазерной техники в производственных технологиях и научных исследованиях посвящена работа [9]. В этой работе в качестве основных направлений применения лазеров указывается следующее.

Металлообработка — сварка, резка, упрочнение.

Микротехнологии — микроэлектроника, обработка пленок, нанесение пленочных слоев, литография, подстройка параметров, интегральная оптика, микрооптика, микромеханика, микрохимия и др.

Лазерная маркировка материалов и изделий.

Полиграфия — изготовление печатных форм, лазерная печать (принтеры) и др.

Оптическая связь и волоконные технологии.

Химические технологии: разделение изотопов, катализ и т.д.

Звуко- и видеозапись и воспроизведение.

Измерения и контроль в технологических процессах, дефектоскопия.

Дистанционные измерения, экологический мониторинг.

Оптическая локация, навигация, дальнометрия, батиметрия.

Лазерная спектроскопия.

Клиническая медицина – хирургия, терапия и диагностика, и биология (все направления клинической медицины).

Голография и ее применения.

Реставрация художественных произведений (в т. ч. очистка).

Трехмерное моделирование и синтез 3-х мерных объектов.

Различные области естественных наук и наук о человеке.

В настоящем учебном пособии мы подробно рассмотрим только те вопросы, которые связаны с воздействием лазерного излучения на металлические материалы и порошки.

2.1. Технологии лазерной обработки металлов

Процессы плавления и испарения металлов лежат в основе многочисленных технологических процессов в области металлообработки, а также обработки других материалов. Это лазерная сварка и лазерная термооб-

работка поверхностей (например, закалка сталей), пробивка отверстий, в том числе в таких тугоплавких и твердых материалах, как сапфир и алмаз, раскрой листовых материалов. Очевидными перспективными отличиями лазерных технологий являются предельно высокая пространственная локализация воздействия, исключительная непродолжительность воздействия, позволяющая локализовать пространственно область теплового воздействия, бесконтактность, возможность строгой дозировки воздействия. Эти особенности делают лазерные технологии в ряде случаев не только прогрессивными, но и незаменимыми. В основе всех этих технологий лежат процессы плавления и испарения твердого тела лазерным излучением.

Применяемый в практике термин “лазерное упрочнение” (см., например, [10–19]) включает в себя, как правило, широкий спектр физических процессов, протекающих вследствие лазерного термического воздействия на материалы и сплавы. Интенсивный лазерный поток поглощается приповерхностным слоем и приводит к структурным изменениям, зависящим от режимов лазерной обработки и физических свойств обрабатываемых материалов. Поэтому термин “лазерное упрочнение” следует понимать как процесс целенаправленного изменения структурно-чувствительных механических свойств материалов и сплавов посредством лазерного термического воздействия. Основываясь на том, что большинство механических свойств структурно-чувствительны, следует обращать особое внимание на закономерности структурообразования при вариациях условий и режимов лазерной обработки.

Любая термическая обработка заключается в нагреве сплавов при различных температурах и охлаждении их с разными скоростями. При этом изменяются фазовое состояние и структура сплавов и, вместе с тем, в широких пределах изменяются их физические и механические свойства. Энергетические параметры лазерного воздействия (плотность мощности E , дли-

тельность τ воздействия, коэффициент $A_{эф}$ поглощения лазерного излучения поверхностью) и физические свойства обрабатываемого материала (коэффициент α_S температуропроводности, коэффициент D_S диффузии в твердой фазе) определяют тепловые и диффузионные процессы, приводящие к тем или иным структурным изменениям и фазовым превращениям. В зависимости от степени теплового влияния на приповерхностные слои лазерное упрочнение подразделяется на отжиг, гомогенизацию, отпуск, лазерную закалку, перекристаллизацию (в литературе — оплавление поверхности), высокоскоростную перекристаллизацию (*Rapid solidification processes*). На рис. 2.1 представлены основные энергетические параметры перечисленных процессов.

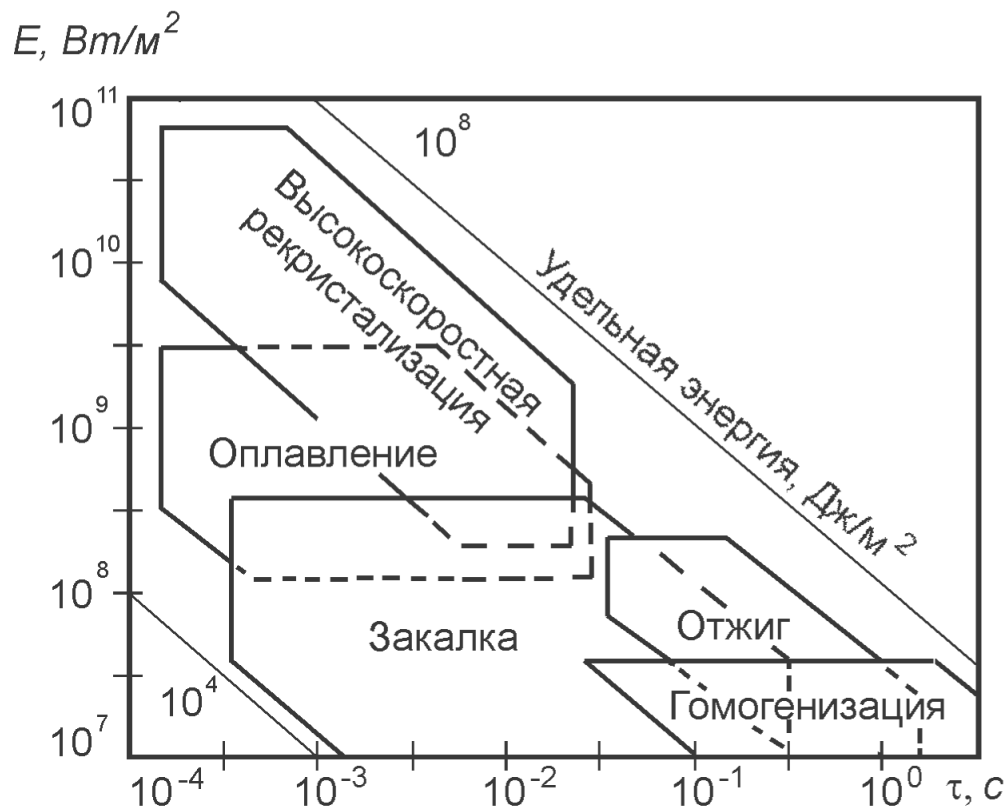


Рис. 2.1. Классификационная диаграмма разновидностей лазерной технологии по энергетически — временным параметрам (E — плотность мощности, τ — длительность воздействия [11]).

Отметим особенности протекания приведенных на рис. 2.1 процессов в условиях высокоскоростного лазерного нагрева. *Гомогенизация* и соответствующий ей отжиг — процесс, который в практике термической обработки используется для устранения ликвационных неоднородностей, в том числе междендритной ликвации [20]. Лазерная гомогенизация чаще всего используется как первый этап лазерной обработки с целью уменьшения структурных неоднородностей в приповерхностных слоях.

Отпуск — процесс нагрева закаленной стали, при котором распадаются мартенсит и остаточный аустенит. В структуре стали при скоростном лазерном отпуске следует ожидать получения очень мелких карбидов ввиду кратковременности воздействия. Поэтому после лазерного отпуска, по сравнению с печным отпуском, сталь имеет более высокую прочность, твердость, ударную вязкость, меньшую хрупкость [11].

Закалка. Термин “лазерная закалка” применительно к железоуглеродистым сплавам широко используется в современной литературе, обобщая в себе, как правило, весь диапазон видов лазерной термической обработки, т.е. лазерного термоупрочнения. Характерной чертой лазерной закалке является высокая скорость нагрева и охлаждения порядка $10^2 — 10^8$ К/с [13]. Высокая скорость охлаждения при превращении высокотемпературной фазы — аустенита в железоуглеродистых сплавах приводит к сильному переохлаждению последнего (около 600 К) [20], в результате чего появляются метастабильные фазы, не учтенные на диаграмме фазового равновесия. Поэтому во всем энергетическом диапазоне лазерного упрочнения имеет место мартенситное превращение переохлажденного аустенита, что и обуславливает появление закалочных структур в ЗЛВ углеродистых сталей. Фазовое и структурное состояние лазерно — упрочненных слоев (ЛУС) подробно рассмотрено в п. 2.1.1, стр. 77.

Оплавление поверхности применяют, преследуя две цели. Во — первых, с целью увеличения толщины упрочненного слоя при лазерной закалке и, во — вторых, с целью изменения микрогеометрии поверхностного слоя [11]. Увеличение качества поверхности при помощи лазерного оплавления широко применяется для деталей из порошковых сплавов с целью улучшения микрорельефа поверхности и увеличения плотности поверхностного слоя. Однако при использовании такой технологии необходимо учитывать гидродинамическое перемешивание расплава под действием термокапиллярных сил. В зоне оплавления возникают высокие градиенты поверхностного натяжения и, вследствие этого, образуется циркуляционное движение в жидкости до 150 мм/с [10]. Изменение давления внутри расплава требует компенсации, что искривляет поверхность жидкой ванны (см. рис. 2.2). Лазерная закалка с оплавлением поверхности чаще всего выпол-

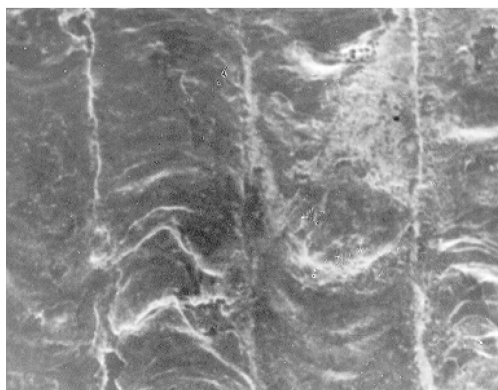


Рис. 2.2. Характерный вид дорожек упрочнения с оплавлением поверхности. Увеличение $\times 15$.

няется для увеличения толщины ЗЛВ [10]. Однако микротвердость структурных слоев зоны оплавления может быть существенно ниже микротвердости в зоне отсутствия оплавления (см. рис. 2.3).

Высокоскоростная перекристаллизация — новейший инструмент для формирования метастабильных фаз в твердых растворах систем спла-

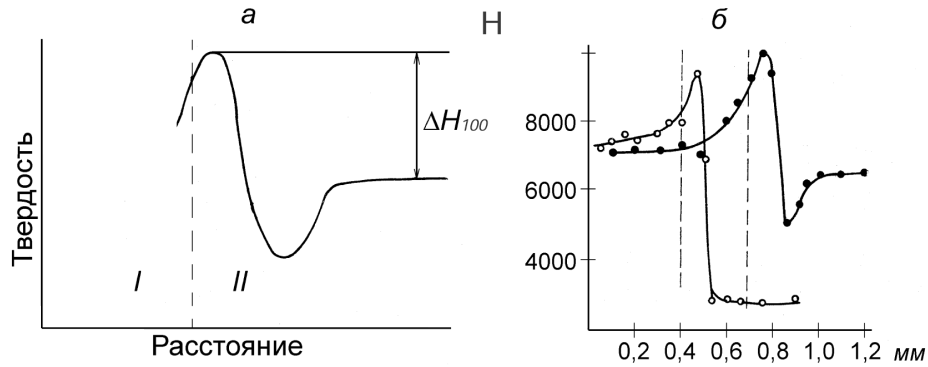


Рис. 2.3. Изменение микротвердости в ЗЛВ с оплавлением поверхности: *а* — общий характер изменения микротвердости, *б* — для стали ШХ15 (● — предварительно закаленной, ○ — после закалки и отпуска 650°С в течение трех часов).

вов, позволяющий получить структурное состояние, существенно отличающееся от равновесных условий кристаллизации. В частности, было показано, что при быстрой кристаллизации возможно появление ячеистых, полосчатых и химически однородных микроструктур, а также замораживание выделенных новых метастабильных фаз [36, 37]. Также такие процессы применяются для получения микроструктур с более равномерным распределением примеси. Высокоскоростная кристаллизация охватывает скорости роста структур в диапазоне от 10^{-2} до 10^2 м/с (получено глубоким переохлаждением материалов). В процессах лазерной высокоскоростной кристаллизации скорость движения границы раздела фаз достигает 4 м/с [24], что существенно выше определенных пределов, достигнутых при кристаллизации отливок, и сравнима со скоростями кристаллизации, достигнутыми методами электромагнитной левитации [38, 39]. При таких скоростях роста равновесные процессы на границе раздела фаз не имеют места, и следует рассматривать процессы структурообразования с точки зрения формализма локально неравновесной кристаллизации [22]. При скоростях движения границы раздела фаз свыше 1 м/с для сталей [23] описание массообмен-

ных процессов вблизи фронта кристаллизации возможно только с учетом характерного эффекта локально—неравновесной кристаллизации — диффузионной релаксации растворенных компонентов примесей в сплавах [22]. Процесс лазерной высокоскоростной кристаллизации подробно изучен западными учеными применительно к алюминиевым сплавам [24—33]. Российские ученые также внесли весомый вклад в области теоретического описания процессов кристаллизации металлических материалов [34, 35, 40].

2.1.1. Структурные изменения и фазовые превращения железоуглеродистых сплавов в процессе лазерного упрочнения

Вследствие поглощения лазерного излучения поверхностным слоем обрабатываемого материала происходит быстрый разогрев этих участков до высоких температур. После прекращения действия излучения нагретый участок охлаждается с высокой скоростью, как правило, вследствие теплоотвода во внутренние слои материала и частично за счет теплоотдачи с поверхности. В отличие от известных процессов термоупрочнения (закалка токами высокой частоты, электронагрев, закалка из расплава и другие способы), нагрев при лазерной закалке является локальным, поверхностным процессом. При этом время нагрева и время охлаждения незначительны, практически отсутствует выдержка при температуре нагрева. При лазерной закалке, как и при традиционных методах, на стадии нагрева происходит формирование аустенитной структуры, а затем на этапе охлаждения — бездиффузионное превращение аустенита с образованием метастабильной фазы — мартенсита. В отличие от медленного нагрева, когда вся подводимая теплота компенсируется скрытой теплотой фазового перехода $\alpha - Fe$ в $\gamma - Fe$, т.е. идет на перестройку кристаллической структуры, при лазерном нагреве рост зерна аустенита проходит в условиях непрерывно повышающейся температуры (см. рис. 2.4).

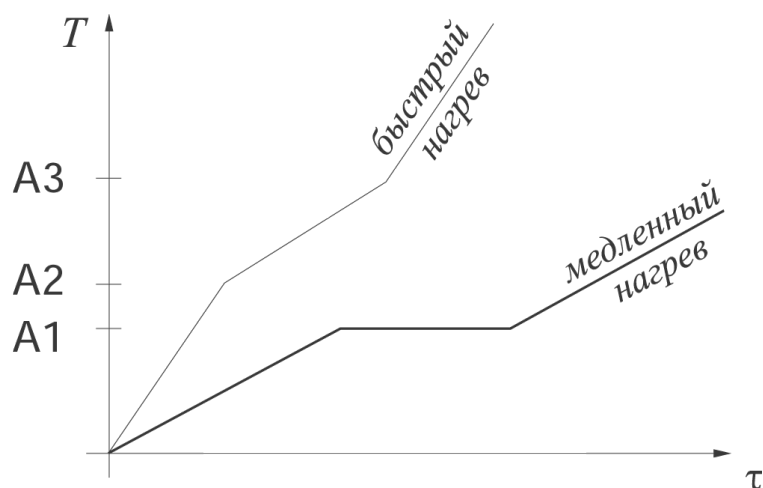


Рис. 2.4. Смещение критической точки A при быстром нагреве [10].

Скорость охлаждения оказывает влияние на температуру начала мартенситного превращения, а также на структуру мартенсита [41]. В стали 45 наблюдаются 2 мартенситные ступени. После закалки от $960\text{ }^{\circ}\text{C}$ мартенситная точка равна $360\text{ }^{\circ}\text{C}$ для интервала скоростей охлаждения $(1 — 12) \cdot 10^3\text{ K/c}$. С увеличением скорости охлаждения мартенситная точка скачкообразно снижается до $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ и далее неизменна (см. рис. 2.5). Структура

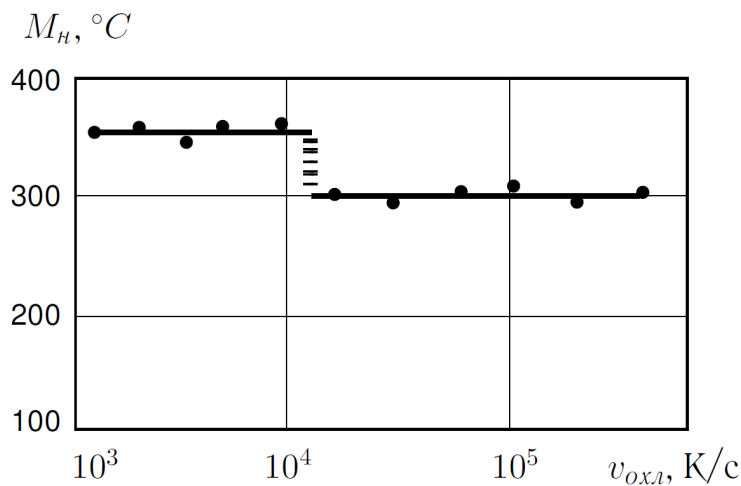


Рис. 2.5. Влияние скорости $v_{охл}$ охлаждения на мартенситные точки M_n стали 45 [41]

мартенсита стали 45 претерпевает определенные изменения при переходе от верхней ступени к нижней. Они заключаются в некотором диспергирова-

нии мартенситных реек и в образовании пластин мартенсита, содержащих двойники, которые похожи на пластины более высокоуглеродистого мартенсита [41].

Рассмотрим кинетику образования аустенита в доэвтектоидной стали, состоящей из ферритовой и перлитной структуры. При нагреве в интервале межкритических температур точек A_{C1} – A_{C3} происходит перестройка кристаллической решетки из ОЦК в ГЦК. Зарождение зерен аустенита (твёрдый раствор углерода в γ – Fe) происходит на границе феррита (α – Fe) с цементитом. Причем полиморфное превращение при нагреве с очень высокими скоростями может происходить по бездиффузионному механизму, что объясняется нехваткой времени для самодиффузии атомов кристаллической решетки в условиях все повышающейся температуры [20]. Особый интерес у исследователей вызывает вопрос: является ли этот механизм сдвиговым, т.е. аналогом мартенситного превращения. Некоторые доказательства в пользу сдвигового механизма аустенита при лазерном нагреве были получены в работе [42]. В результате образующаяся γ –фаза растёт когерентно со старой α –фазой, чем и объясняется эффект структурной наследственности при лазерной закалке [15] (см. рис. 2.6). В дальнейшем происходит рост зерна аустенита. Весьма термодинамически выгодно образование зародышей новых зерен, в результате чего происходит увеличение дефектности кристаллитов в исходной структуре. Образование зародышей происходит не только на границах зерен феррита, но и на границах блоков и дефектов кристаллической структуры, что показано на рис. 2.7 [11]. Рост и образование зерен аустенита, как правило, происходит в течение всего времени нахождения заданного микрообъёма в межкритическом интервале температур. Вследствие нехватки времени для диффузионного выравнивания содержания углерода в аустените (диффундирования углерода от границы бывших перлитных колоний к ферритовым) при лазерной закалке

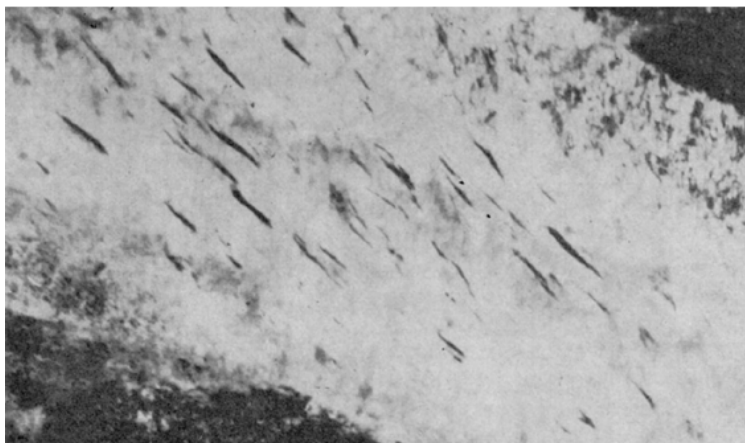


Рис. 2.6. Образование аустенита при лазерном нагреве стали 20ХГСНМ, в светлопольном изображении в рефлексе (200) аустенита, $\times 45\,000$.

возможна неполная аустенизация феррита (до 50%). В этом случае карбиды не успевают полностью раствориться, и в ЗЛВ присутствует неоднородный мартенсит, остаточный аустенит и раздробленная феррито–цементитная сетка. Такая микроструктура имеет пониженную микротвердость, поэтому большое развитие получает лазерное упрочнение предварительно закаленных сталей. Характерным для лазерной закалки является сильно неравномерное распределение углерода в аустените и в образовавшемся из него мартенсите [15], что объясняется нехваткой времени для диффузии углерода, а также дает основание считать справедливым допущение об отсутствии диффузии углерода в твердой фазе при высокоскоростной кристаллизации сплава.

Рассмотрим изменение структуры в ЗЛВ среднеуглеродистой стали, предварительно закаленной на мартенсит [15]. На рис. 2.8 представлена микроструктура стали 38ХН3МФ после лазерной закалки с оплавлением поверхности. В зоне отпуска (рис. 2.8, низ) видна темнотравящаяся структура отпущенного мартенсита. При повышении температуры нагрева травимость структуры резко ухудшается (появляется светлотравящаяся зона в центре рис. 2.8). Это связано с переходом стали в аустенитное состояние

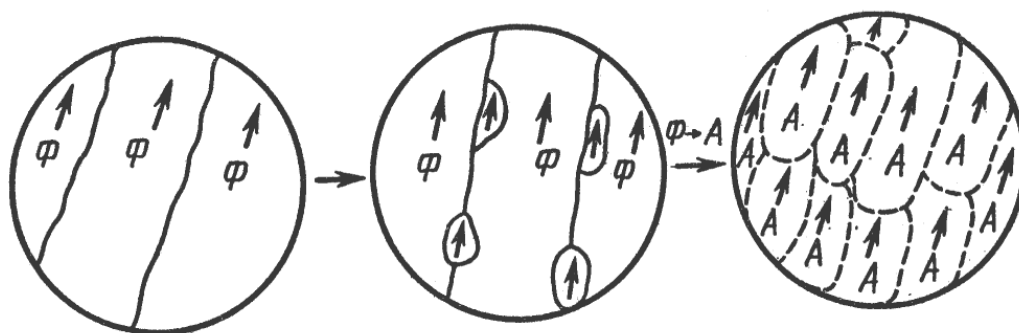


Рис. 2.7. Схема формирования аустенита из ферритовых зерен, одинаково ориентированных в бывшем аустените при быстром нагреве.

при нагреве и ее повторной закалкой при охлаждении. На микрофотографии отчетливо видны хорошо вытравившиеся границы аустенитных зерен. Видно, что непосредственно в процессе фазового превращения образовались такие же крупные зерна аустенита, какие были в стали в исходном состоянии, что является металлографическим выражением структурной наследственности [43]. Значительное измельчение зерна аустенита наблюдается при температурах, существенно превышающих температуру фазового превращения. Это измельчение связано с рекристаллизацией аустенита вследствие фазового наклепа, что специфично для лазерной обработки предварительно закаленных сталей и связано с необычайно высокой скоростью нагрева [15]. В зоне оплавления (верх рис. 2.8) видна структура ячеисто — дендритного типа т.е. кристаллизационная субструктура [15]. Как отмечено в [15, 44], резко выраженная кристаллизационная субструктура не влияет на развитие мартенситных кристаллов — их величина определяется прежде всего размером зерна аустенита.

Таким образом, основная особенность лазерной обработки предварительно закаленных сталей заключается в обязательном проявлении структурной наследственности при нагреве [48]. Высокая скорость нагрева и охлаждения при лазерной обработке влияет и на процессы кристаллиза-

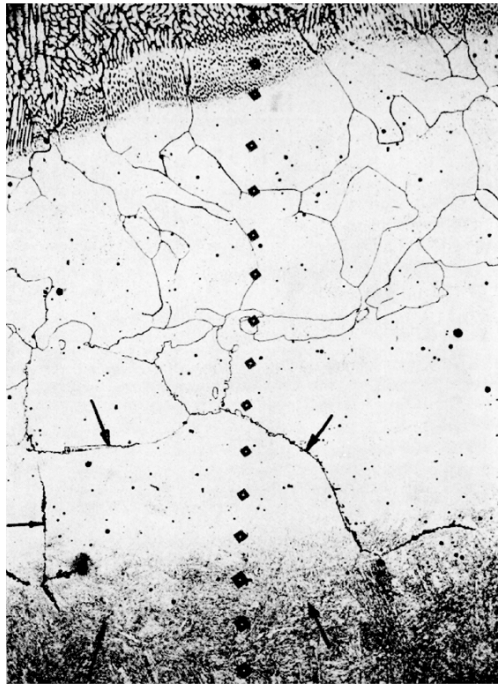


Рис. 2.8. Структура ЗЛВ стали 38ХНЗМФ, предварительно закаленной от 1200 °С [15].

ции расплавленного материала. Только учет эффекта структурной наследственности позволяет понять микроструктуры, приведенные на рис. 2.9, *а*, *б* [15]. Предварительная закалка стали 37ХНЗА производилась от двух тем-

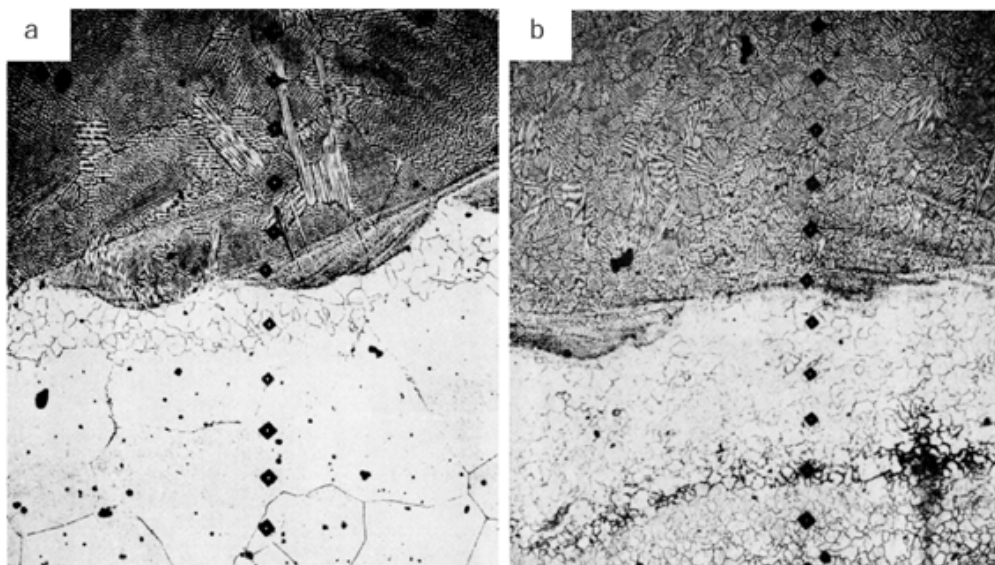


Рис. 2.9. Структура ЗЛВ стали 37ХНЗА, предварительно закаленной от 1200 (*а*) и 900 °С (*б*) [15].

ператур: 1200 и 900 °C. Соответственно, были получены крупно- и мелкозернистая структуры — это результат восстановления аустенитного зерна. В переплавленной зоне обнаруживается крупнозернистая структура после предварительной закалки от 1200 °C (2.9, *а*) и мелкозернистая — после предварительной закалки от 900 °C (2.9, *б*). Как отмечается в [15], такая “память” о структуре — это результат кристаллизации на подкладке. Однако на рис. 2.9, *а* видно мелкое зерно вблизи переплавленной зоны. Это можно объяснить тем, что рекристаллизация аустенита произошла при охлаждении, т.е. после завершения процесса затвердевания [15].

Энергетические характеристики лазерного излучения при обработке с оплавлением поверхности оказывают существенное влияние на формируемую кристаллизационную субструктуру. При увеличении плотности E мощности лазерного излучения и скорости V_b движения луча лазера увеличивается скорость V_S движения фронта кристаллизации [45], что приводит к значительным изменениям в условиях кристаллического структурообразования [25–33]. В частности, с увеличением скорости V_S происходит морфологический переход от плоского фронта кристаллизации к дендритной и, далее, к ячеистой субструктуре. При низкой скорости V_S кристаллизации на отбор направления ансамбля дендритов существенное влияние оказывает анизотропия поверхностной энергии [40]. Поэтому очевидно, что отбор направления роста ансамблей дендритов в начальный момент кристаллизации (на границе зоны оплавления) будет происходить согласно кристаллографической ориентации кристаллов в нерасплавленной области, что и объясняет эффект структурной наследственности при кристаллизации (см. выше). При увеличении скорости V_S кристаллизации анизотропия поверхностной энергии не оказывает влияние на направление роста ансамблей дендритов, и рост кристаллов регулируется только процессами тепломас-

сопереноса [40]. В этом случае проявление эффекта структурной наследственности невозможно.

Увеличение скорости кристаллизации также приводит к монотонному уменьшению характерного размера элемента кристаллизационной субструктуры (ЭКС). В работе [46] изучалось влияние скорости кристаллизации переплавленного лазером сплава Fe – 1,7 вес.%C – 4,3 вес.%Si на морфологию субструктуры, радиус R_d вершин дендритов, ячеек и междендритное расстояние λ_d (показано на рис. 2.10).

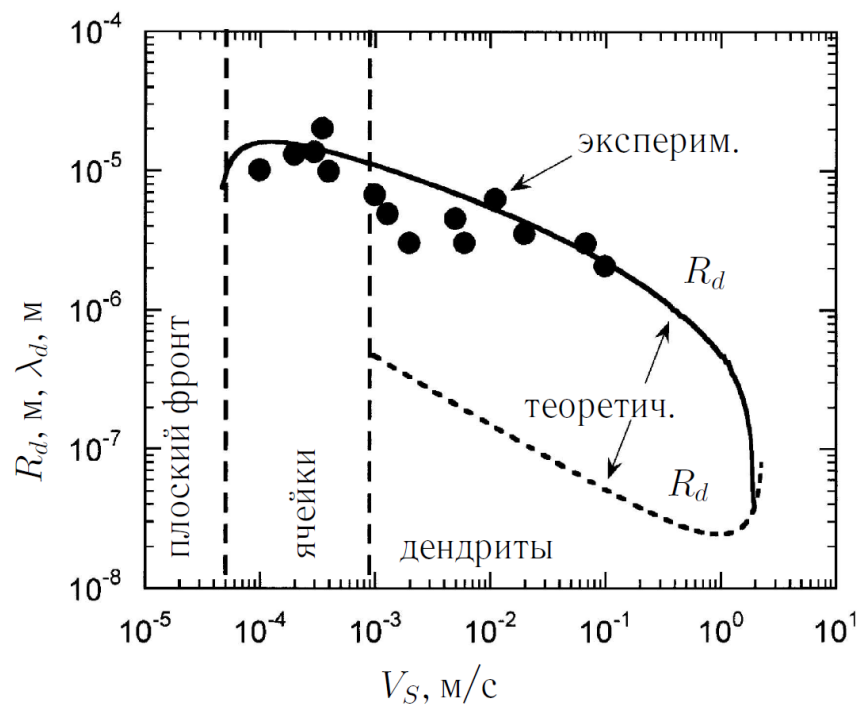


Рис. 2.10. Влияние скорости кристаллизации на радиус R_d вершины дендритов и на междендритное расстояние λ_d . Точками показаны экспериментальные значения. Вертикальные пунктирные линии характеризуют пределы скоростей для каждого типа кристаллизационной субструктуры [46].

2.1.2. Механические свойства сплавов *Fe — C* после лазерного упрочнения

Решение задач, связанных с определением свойств сталей, имеющих структурное состояние, описанное в п. 2.1.1, привлекает внимание многих инженеров и ученых. В этой связи наиболее важным является поиск механизмов, объясняющих достижение определенного уровня свойств при изменении структурных параметров. Понимание механизма упрочнения сталей позволяет рационально использовать характерный для них уровень прочности и в то же время получать оптимальное сочетание их механических свойств с точки зрения экономической эффективности процесса упрочнения.

Особенности структурообразования при лазерной обработке с высокими скоростями нагрева и охлаждения сказываются на различных эксплуатационных свойствах стали и сплавов. На рис. 2.11 показано влияние скорости охлаждения на микротвердость сталей 45, У12 и У15. Скачек микротвердости стали 45 соответствует скорости охлаждения, при которой происходит скачкообразное уменьшение мартенситной точки (см. рис. 2.5). Изменение структуры мартенсита и приводит к увеличению микротвердости. Для сталей с большим содержанием углерода происходит плавное увеличение микротвердости с увеличением скорости охлаждения.

Большое влияние на свойства стали после лазерной закалки оказывает ее исходное состояние. Предварительно отожженные доэвтектоидные стали после лазерной закалки имеют крайне неоднородное распределение микротвердости. На рис. 2.12 показан график изменения микротвердости в отожженной стали 20 после лазерной обработки в зависимости от расстояния от оплавленной поверхности, т.е. фактически в зависимости от температуры нагрева [47]. Граница между зоной оплавления и зоной претерпевшей закалку из твердого состояния, а также граница между зоной закал-

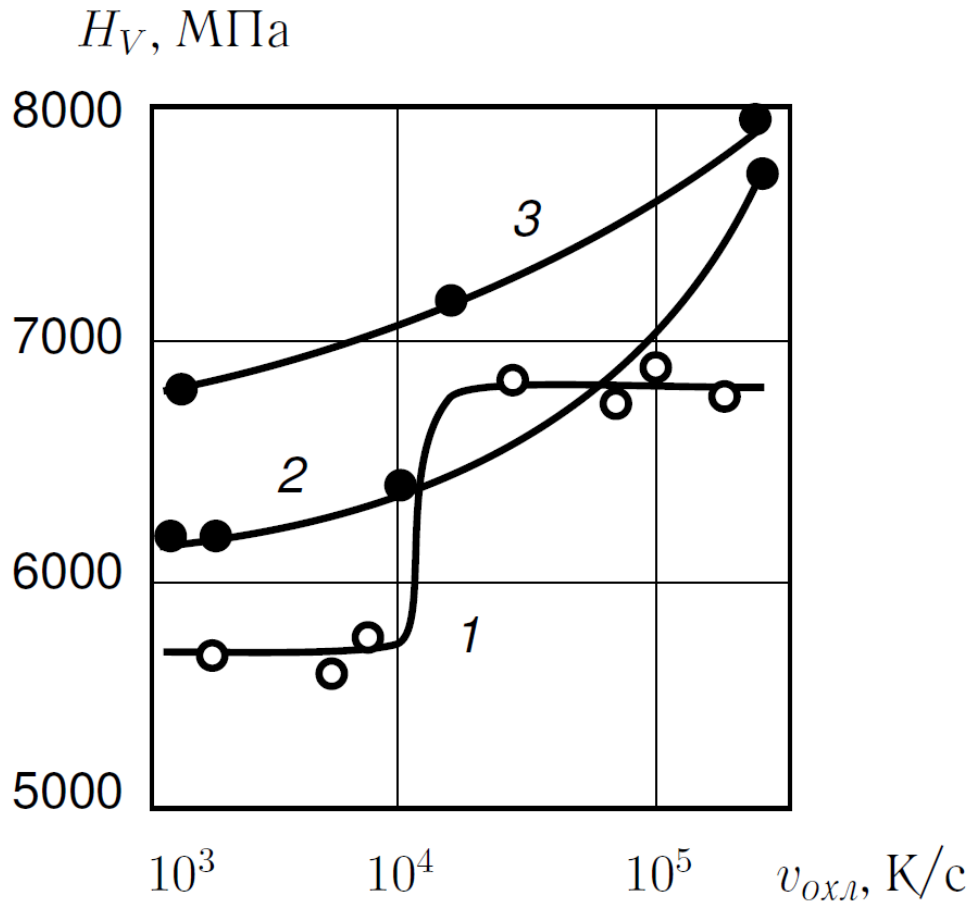


Рис. 2.11. Влияние скорости $v_{охл}$ охлаждения на микротвердость сталей 45 (1), У15 (2) и У12 (3) [41].

ки и отпуска отмечены на графике штриховыми вертикальными линиями. Между ними изображены две различные кривые изменения микротвердости, показывающие, что твердость продуктов превращения, возникших на месте перлитных колоний (кривая 1), соответствует твердости закаленной эвтектоидной стали и намного выше, чем твердость продуктов превращения аустенита, возникших на месте ферритных зерен (кривая 2).

Приведенная на рис. 2.13 кривая изменения микротвердости в ЗЛВ для предварительно закаленной стали 40 ясно указывает на характер происшедших при лазерной обработки процессов [47]. Правая ветвь кривой начинается на уровне обычной твердости закаленной стали 40. По мере продвижения к оплавленной лазером зоне (граница ее помечена штриховой

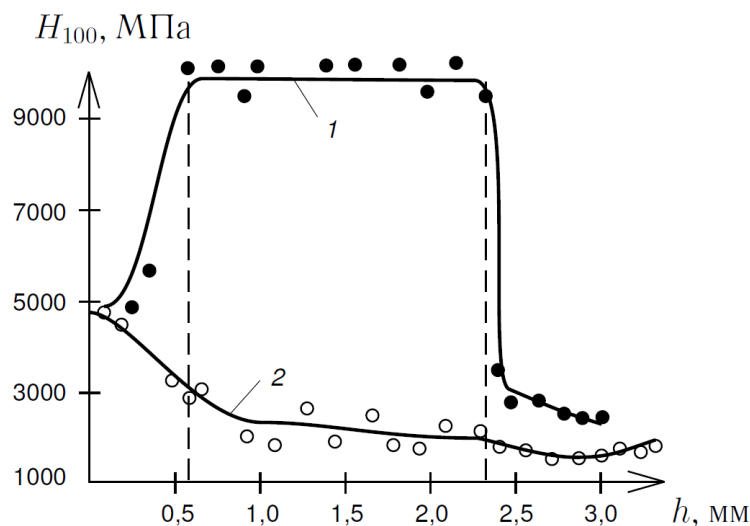


Рис. 2.12. Распределение микротвердости H_{100} по толщине h ЗЛВ стали 20 [47].

линией) твердость сначала падает, что связано с отпуском исходной мартенситной структуры, затем резко поднимается в результате новой закалки и снижается в переплавленной зоне. Такой характер кривой микротвердости повторяется для всех конструкционных и инструментальных сталей. Уровень твердости зоны лазерной закалки зависит от содержания углерода в стали и несколько выше, чем при обычной закалки в воде [15]. Причина повышения твердости заключается в том, что при сверхбыстром охлаждении затруднен самоотпуск мартенсита, вследствие чего он имеет высокую степень тетрагональности [49].

Специфика лазерного термического воздействия оказывает влияние и на износостойкость сталей [50, 51]. Показано, что высокая прочность обработанных излучением лазером поверхностей стали 35 в сильной степени ограничивает развитие на них процессов схватывания, которые интенсивно протекают на неупрочненных участках поверхности образца. Изнашивание упрочненных поверхностей в условиях испытания при трении скольжения носит преимущественно усталостный (полидеформационный) характер [50]. Повышение абразивной износостойкости обусловлено ростом твердости

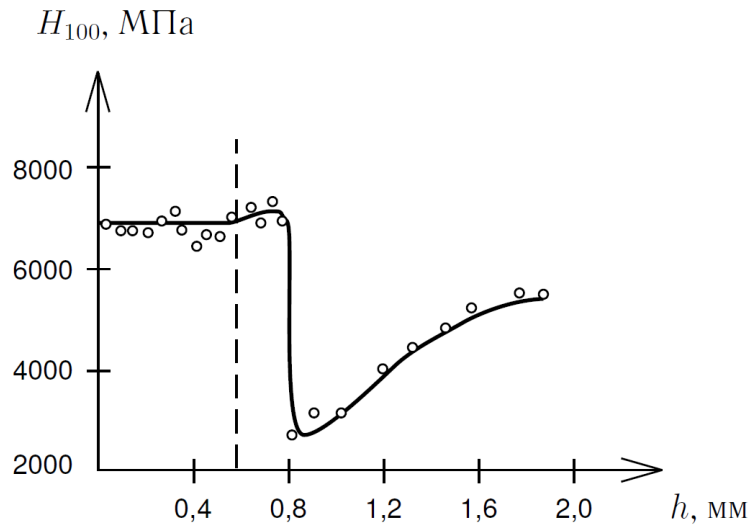


Рис. 2.13. Распределение микротвердости H_{100} по толщине h ЗЛВ в предварительно закаленной стали 40 [47].

стали после лазерной обработки, в результате чего ограничивается развитие процессов пластического оттеснения и микрорезания, являющимися основными механизмами разрушения в условиях абразивного изнашивания [50].

Существенно возрастает износостойкость упрочненных лазером низкоуглеродистых сталей [51]. Электронно—микроскопическое исследование поверхностей трения образцов с двухфазной ферритно—мартенситной структурой показало, что на ферритных участках интенсивно протекают процессы схватывания. Изнашивание мартенситных участков носит преимущественно усталостный характер. Проведенные исследования показали, что износостойкость низкоуглеродистых сталей, обработанных лазером без оплавления поверхности, существенно выше, чем при обработке с оплавлением, и зависит от доли возникающей при этом высокопрочной мартенситной составляющей структуры [51]. Уменьшение износостойкости образцов, упрочненных лазером с оплавлением поверхности, по сравнению с образцами, обработанными без оплавления, обуславливается образованием в зоне оплавления малоуглеродистого мартенсита.

Работа [47] содержит результаты систематического исследования влияния лазерной закалки углеродистых и низколегированных сталей с различным содержанием углерода. Помимо влияния химического состава сталей и технологических параметров лазерной обработки на износостойкость стальной поверхности большое внимание уделено структурным аспектам износостойкости закаленных лазером сталей. Высокая износостойкость структур лазерной закалки исследованных сталей как при трении скольжении, так и при абразивном изнашивании обусловлена присутствием в них тетрагонального неотпущенного мартенсита, а также метастабильного остаточного аустенита. Тетрагональный мартенсит лазерной закалки, наряду с его большой твердостью характеризуется также способностью к интенсивному деформационному упрочнению в процессе изнашивания, что обеспечивает ему высокую эффективную прочность и износостойкость по сравнению с малоуглеродистым низкоотпущенным мартенситом. Интенсивное деформационное упрочнение тетрагонального мартенсита при изнашивании обусловлено протеканием в нем процессов деформационного динамического старения, которое характеризуется выходом части (0,2 – 0,3 %) углерода из α – решетки в примесные атмосферы, возникающие при деформационном нагружении дислокаций. Значительная энергия связи атомов углерода с дислокациями обеспечивает сильное закрепление дислокаций примесными атмосферами и, соответственно, высокий уровень деформационного упрочнения поверхностного слоя сталей (толщиной менее 15 мкм) со структурой тетрагонального мартенсита. Присутствующий в закаленных лазером сталях остаточный аустенит в процессе деформации претерпевает мартенситное $\gamma \rightarrow \alpha$ превращение. Возникающий при этом мартенсит деформации является неотпущенным мартенситом и по своей износостойкости он не уступает тетрагональному мартенситу охлаждения, содержащему такое же количество углерода [47].

Как было отмечено, в п. 2.1.1 при лазерном нагреве может происходить рекристаллизация аустенита вследствие фазового наклепа, что приводит к измельчению аустенитного зерна. Влияние размера аустенитного зерна на износостойкость сталей мартенситного класса изучалось в работах [52, 53]. Показано, что размер зерна стали оказывает существенное влияние на износостойкость. Однако это влияние неоднозначно. При малых скоростях скольжения, когда фрикционный нагрев поверхностного слоя сталей невелик, наибольшей износостойкостью обладает сталь с мелким (10–20 мкм) зерном. В условиях интенсивного фрикционного нагрева (скорость скольжения более 3,0 м/с) сталь со сверхмелким (~ 1 мкм) зерном характеризуется повышенным сопротивлением адгезионному изнашиванию [52].

В большинстве работ количественное описание прочностных свойств, характерных для структурного и фазового состава при лазерном упрочнении сталей, основывается на установлении эмпирических зависимостей. Наиболее часто в литературе встречаются зависимости, построенные в виде графиков или диаграмм, характеризующие механические свойства от конкретных режимов лазерной обработки (см., например, [10, 54]). Будучи верными принципиально, такие зависимости (см., например, выражение (2.1)) не отражают физической природы прочности сталей, хоть и имеют практическую ценность. В работе [54] предложена зависимость распределения микротвердости $H_V(z)$ по толщине ЗЛВ

$$H_V = \frac{H_n}{\left(\frac{H_n}{H_c} - 1\right) \cdot \left(\frac{z}{h_c}\right)^4 + 1}, \quad (2.1)$$

где H_n и H_c — значения микротвердости поверхности и слоя с исходным состоянием; h_c — толщина упрочненного слоя; z — текущая координата рассматриваемой точки по толщине слоя. В работе [55] показана зависимость механических свойств, в частности, предела σ_B прочности, предела $\sigma_{0,2}$ те-

кучести и величины относительного удлинения, δ от количественного соотношения мартенсита и остаточного аустенита для сталей с различным содержанием углерода, легированных никелем. Выявлено линейное увеличение σ_B , $\sigma_{0,2}$ с увеличением доли α -фазы.

2.1.3. Область применения и практика внедрения лазерного упрочнения сталей

Наиболее широкая область применения технологии лазерного упрочнения — инструментальное производство, при изготовлении и эксплуатации режущего инструмента, элементов штамповой оснастки. Другая важная область применения — упрочнение рабочих поверхностей деталей различных машин и приборов.

В различных источниках приводятся данные о высокой эффективности внедрения лазерного упрочнения в инструментальном производстве. Упрочнение резцов, фрез, сверл, разверток показало, что стойкость инструмента при чистовой обработке увеличивается 2 — 2,5 раза, при черновой в 2,5 — 3 раза. В результате лазерного упрочнения износостойкость штампов повышается в 1,6 — 3 раза. Износ инструмента при лазерном упрочнении уменьшается за счет повышения твердости поверхностных слоев, при этом сохраняется общая динамическая прочность, увеличивается теплоустойчивость, снижается коэффициент трения пары режущий инструмент — заготовка [17].

Не менее эффективно лазерное упрочнение рабочих поверхностей деталей машин и приборов. В любой машине, станке, приборе есть детали, лимитирующие ресурс их работы и для которых лазерное упрочнение может быть целесообразным. В автотракторостроении лазерное упрочнение применяется для повышения износостойкости распределительных валов, коленчатых валов, шестерен заднего моста, рабочих поверхностей клапанов,

клапанных седел, поршневых канавок, компрессионных колец и др. (ссылки на конкретные примеры внедрения технологии лазерного упрочнения можно найти в источниках [17, 18]).

Следует отметить, что основной целью лазерного упрочнения сталей является повышение износостойкости деталей, работающих в условиях абразивного, адгезионного и усталостного износа [50–52].

2.2. Селективное лазерное спекание порошков

Созданный метод лазерного высокоскоростного компактирования базируется на активно развиваемой зарубежными коллегами технологии селективного лазерного спекания (Selective laser sintering – SLS) [76, 77]. Успех развития SLS-технологий заключается как в возможности быстрого создания прототипов деталей, так и в изготовлении самих деталей для промышленного производства практически из любых материалов. В наше время большое число материалов на основе пластика, песка, бронзы, стали, цветных и тугоплавких металлов доступны для применения. Некоторые коммерческие организации уже изготавливают специальные материалы для SLS-технологий [78, 79]. Гибкость технологии достигается благодаря непосредственному компьютерному управлению процессом, причем, в отличие от традиционных методов изготовления деталей, где требуется механическая обработка, трехмерные детали изготавливаются непосредственно путем послойного напекания порошка. Металлические изделия, изготовленные методом SLS, применяются для изготовления литейных форм, в том числе для литья под давлением, и в мелкосерийном производстве.

2.2.1. Метод лазерного спекания порошков

Несмотря на то, что SLS-технология обеспечивает получение хорошей точности размеров деталей и повторяемость производства, её при-

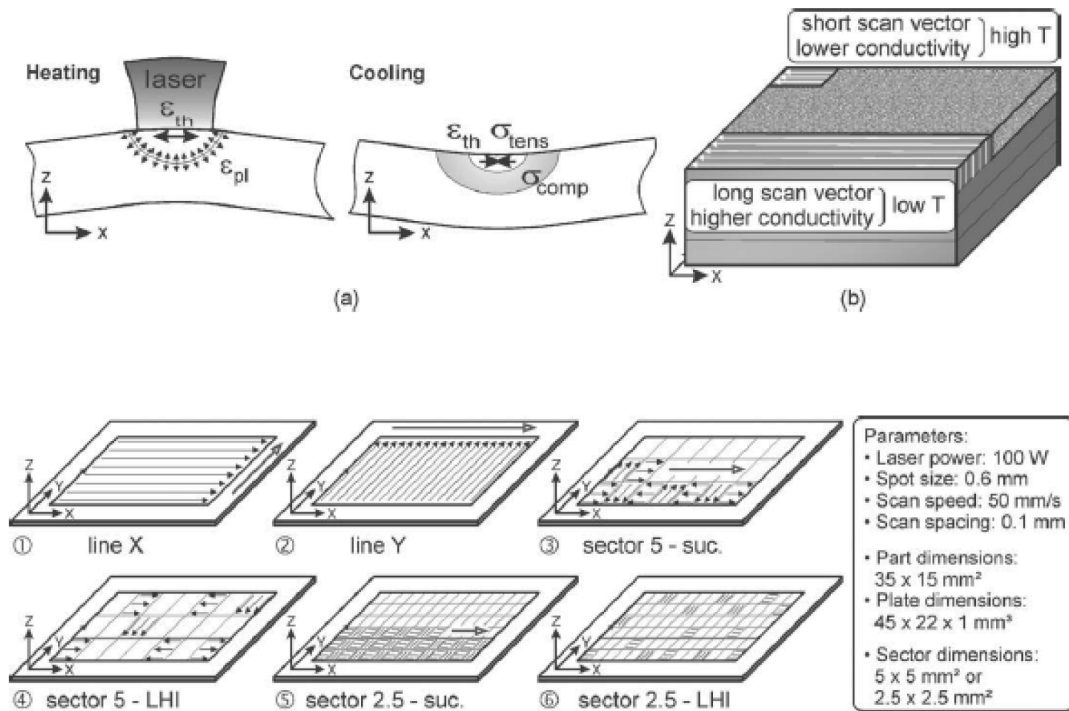


Рис. 2.14. Различные способы сканирования луча лазера [80]: а — механизм образования градиента температуры; б — различие температуры при разных способах сканирования

менение ограничено резким снижением механических и триботехнических свойств [80]. Более того, в результате оплавления частиц порошка (обычно используются порошки со средним размером частиц 5 мкм) и действия термокапиллярных сил в материале образуются поры и раковины размером до 100 мкм, что является дефектом, ограничивающим применение деталей. Проплавление большой массы порошкового материала и относительно низкая скорость движения луча лазера в SLS-процессах (порядка 50 мм/с) приводит к образованию значительных напряжений растяжения полученного покрытия. Это ожидаемый результат, так как формирование каждого слоя представляет закалку из жидкой фазы при высоком градиенте температуры. Авторы работы [80] предложили использовать комбинированную схему сканирования луча лазера (см. рис. 2.14), что позволило несколько снизить термические напряжения в обрабатываемом слое.

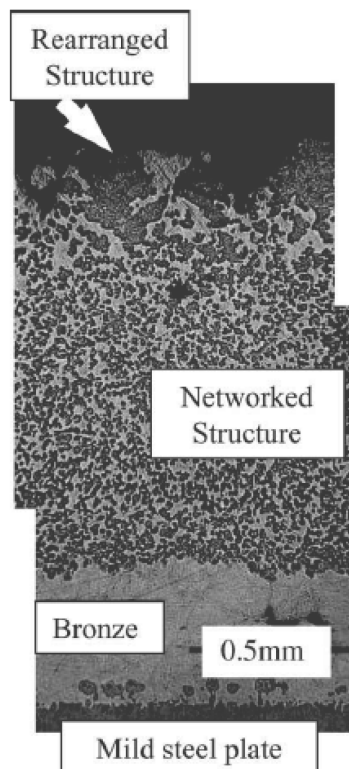


Рис. 2.15. Структура SLS-слоев системы WC-Co, пропитанных медным сплавом [81]

В работе [81] для повышения износостойкости SLS-материалов на основе системы WC-Co использовалась пропитка спеченных слоев медным сплавом. Проникновение бронзы в матрицу позволяет увеличить плотность материала, а также улучшить сцепление с подложкой (см. рис. 2.15). Испытание песком на износостойкость полученных материалов показало положительное влияние пропитки.

Возможность SLS-обработки экзотермических порошковых смесей широко используется в самораспространяющемся высокотемпературном синтезе (SHS). В частности, покрытия, полученные из порошковых смесей систем Ni-Al, Ti-Al, Fe-Ti и Ni-Ti со стехиометрическими и близкими к ним составами, продемонстрированы в работах [82, 83]. Существование структурно-фазовых превращений в SLS-процессах позволяет расширить применимость и функциональные возможности технологии, поскольку в

этом случае производственный процесс предполагает не только жидкофазное спекание, но и синтез новых интерметаллидных фаз, не существовавших в исходном порошке. Так, например, алюминиды NiAl , Ni_3Al характеризуются высокой теплостойкостью при работе с потоками горячих газов, тогда как интерметаллид AlTi применяется для высокотемпературных радиационно-стойких покрытий. Алюминиды титана могут быть использованы в качестве пористой матрицы для хранения и доставки каталитического агента, а титаниды никеля хорошо известны своей биосовместимостью.

В вышеописанных аспектах применения материалов необходимо уделять большое внимание структурно-фазовому состоянию слоев, полученных в SLS-процессах, в связи с тем, что оно определяет качество деталей. Как отмечено в работах [82, 83], существует ясная корреляция между энергетическими параметрами лазерной обработки и морфологией структуры поверхностных слоев, полученных в SLS-процессах с участием интерметаллидов. В работе [84] эволюция микро- и макроструктуры в зависимости от параметров лазерной обработки рассмотрена в аспектах анализа фрактальной размерности структуры. Вполне ясно, что переход от нано- к микро- и макроструктурным уровням может быть объяснён перколяционным переходом, который является переходом материала к состоянию, где взаимодействие между частицами (атомами) может быть описано в формализме формирования фрактального кластера. Эволюция кластеров управляет как структурно-чувствительными характеристиками, такими как размер пор, шероховатость поверхности, так и самим процессом структурообразования, включая процессы коагуляции и рекристаллизации. В работе [85] топология субструктуры поверхности (см. рис. 2.16), полученной SLS-синтезом материалов, образующих интерметаллиды, была исследована методом растровой электронной микроскопии и сопоставлена с фрактальной размерностью. Показано, что в результате кристаллизации в зави-

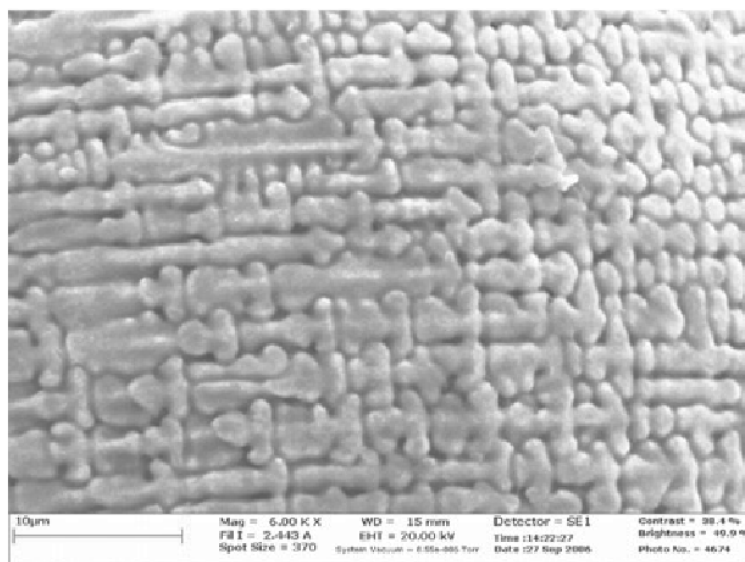


Рис. 2.16. Микроструктура SLS-спеченных интерметаллидов, диаметр луча лазера $L_b \sim 100$ мм: Ni-Al = 3:1, $P = 30,3$ W, $v = 11,4$ см/с [85]

симости от типа интерметаллидов возникают субструктуры ячеистого или дендритного типа, а характерный размер элементов субструктуры зависит от плотности мощности лазерного излучения.

Общей чертой SLS-технологий является низкая скорость введения тепловой энергии. Наиболее часто в этих процессах используется непрерывный режим генерации лазерного излучения. При импульсно-периодическом режиме излучения частота следования импульсов составляет единицы Герц, а время действия импульсов — микросекунды.

В течение последних десятилетий получен обширный экспериментальный материал по фазовым переходам в условиях лазерной обработки, из которого установлена взаимосвязь между параметрами структуры и скоростью движения фронта кристаллизации. Показано, что с увеличением скорости многие системы способны претерпевать превращения в условиях нарушения локального термодинамического равновесия, при которых формируется метастабильное структурно-фазовое состояние. Более того, увеличение скорости кристаллизации приводит к активному диспергированию

структуры с уменьшением характерного размера её элементов. Большое число работ (см., например, [86]) устанавливает корреляцию между параметрами структуры и комплексом механических свойств. Уменьшение характерного размера элементов субструктуры, возникающее при увеличении скорости лазерной обработки, положительно влияет на такие важные свойства материалов, как твердость, прочность и износостойкость.

2.2.2. Особенности метода лазерного высокоскоростного спекания

Понимание механизмов, управляющих процессами структурообразования при лазерной обработке, естественным образом приводит к идее модернизации семейства SLS-технологий путём изменения энергетических режимов лазерной обработки материалов в сторону значительного увеличения скорости кристаллизации. Высокая локальность скоростной лазерной обработки ультрадисперсных материалов позволяет избежать недостатков, присущих традиционным SLS-технологиям (термические напряжения, крупные поры, неровность поверхности и большой припуск на механическую обработку), формировать и фиксировать метастабильное структурное состояние с уникальными механическими свойствами.

В настоящей работе используется излучение иттербиевого оптоволоконного лазера, работающего в импульсно периодическом режиме генерации излучения. Энергетические параметры лазерной обработки в сравнении с аналогичными параметрами SLS-технологий представлены в табл. 2.1.

Основная особенность метода лазерного высокоскоростного спекания заключается в осуществлении крайне локального воздействия на ультрадисперсные частицы порошка при сканировании луча лазера. Процесс формирования структуры в этих условиях носит сильно неравновесный характер. Масштаб времени, в котором протекают процессы структурообразования, составляет величину 10^{-5} с. В результате эффективного теплоот-

Таблица 2.1. Энергетические параметры лазерной обработки

Наименование параметра	Высокоскоростное компактирование	SLS-технологии
Время импульса	100 нс	3-5 мкс
Частота импульсов	30-60 кГц	3-10 Гц
Скорость сканирования	100-600 мм/с	20-200 мм/с
Диаметр луча в фокусе	30 мкм	100 мкм
Мощность лазера	15-40 Вт	100-400 Вт
Средний размер частиц порошка	800 нм	3-5 мкм
Толщина слоя порошка	40 мкм	100 мкм

вода развивается высокая скорость кристаллизации (~ 1 м/с), что вызывает скоростные фазовые превращения с образованием метастабильных фаз. Вследствие различия размеров соседних частиц порошка в суспензии одни частицы под действием лазера целиком испаряются, другие полностью переходят в жидкую фазу, а часть порошка проплавляется частично. При остывании происходят соответственно процессы конденсации из газообразной фазы, кристаллизации частично расплавленных частиц и спекания с соседними нерасплавленными частицами.

Технология лазерного высокоскоростного компактирования представляет из себя многократно повторяющийся циклический процесс, заключающийся в подаче порошковой смеси на поверхность детали и лазерной обработки порошкового слоя. В целях исключения окисления материалов в процессе лазерной обработки рабочее пространство откачивается до давления 10^{-2} мм.рт.ст. Общий вид лазерной установки и вакуумной камеры представлен на рис. 2.17.

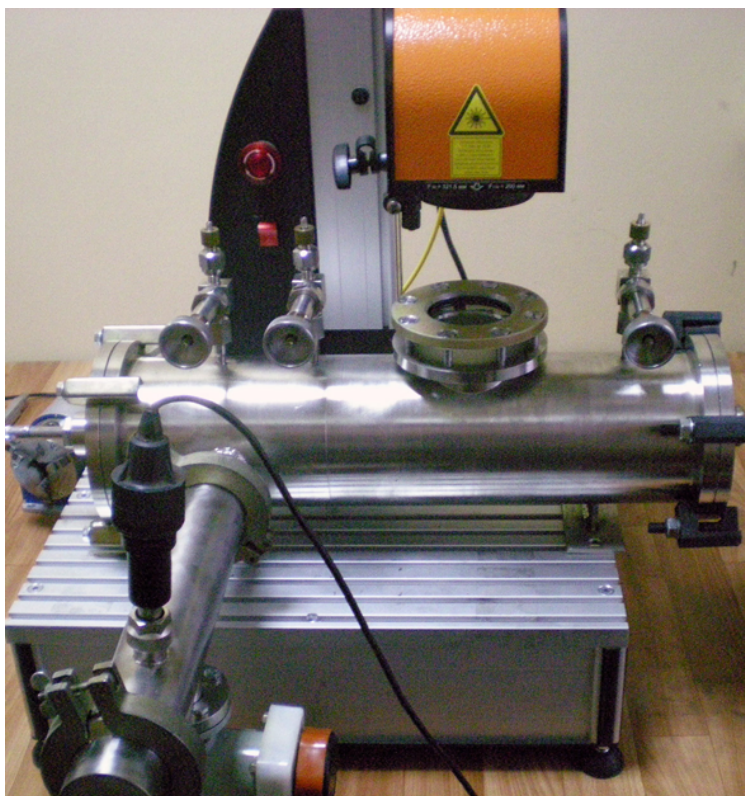


Рис. 2.17. Общий вид лазерной установки и вакуумной камеры

Вопросы для самопроверки

1. Назовите виды лазерной обработки металлов и сталей.
2. Каковы особенности структурных превращений при лазерном нагреве сталей?
3. Запишите уравнение теплопроводности для условий лазерной обработки.
4. Как зависят параметры субструктуры сталей и механические свойства от скорости движения фронта кристаллизации при лазерной обработке?
5. Область применения лазерной обработки.
6. В чем заключается принцип селективного лазерного спекания порошков?

3. РАСЧЕТ ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУР В ПОРОШКОВОМ СЛОЕ

Современный подход к разработке новых технологий основан на комбинировании различных методов, когда высокоточные экспериментальные измерения сочетаются с многосторонним теоретическим анализом. В связи с этим для достижения поставленных целей в любой работе важно понимать принципы построения теоретических моделей, уметь использовать средства компьютерного моделирования. В этой и последующей главах дано описание различных подходов к теоретическому описанию процессов лазерной закалки. Как и в случае с экспериментальными данными, сочетание нескольких методов позволяет повысить точность анализа и подтвердить достоверность полученных результатов, сопоставляя результаты моделирования, полученные с применением моделей, основанных на разных принципах.

Большинство разработанных в научных и технических областях моделей строится на использовании уравнений баланса (сохранения) некоей физической величины, когда исследуется значение механической или внутренней энергии, импульса или количества вещества в некоторой области, выделенной для рассмотрения. Тогда полное значение этой величины в области сохраняется, если система замкнута, или изменяется пропорционально величине потока указанной величины через границы области. В этом смысле II закон Ньютона для поступательного движения, уравнение диффузии, I начало термодинамики и многие другие относятся к уравнениям рассматриваемого типа. Часто в некоторых областях знаний, например,

теоретической механике, говорят о применении уравнений движения, что является синонимом понятия уравнения баланса.

3.1. Численное моделирование фазовых переходов в пакете Comsol MultiPhysics

Программный пакет Comsol MultiPhysics разработки компании Comsol Inc. — это мощная вычислительная среда для моделирования и решения широкого класса задач, возникающих в инженерных и естественно-научных исследованиях. Зачастую эти задачи сводятся к решению дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих законы сохранения энергии, массы и импульса. В практической работе специалист нередко сталкивается со сложными физико-химическими явлениями, когда реализуются несколько взаимосвязанных процессов. Примером такого рода может служить задача протекания электрического тока в проводнике, когда, как известно, наблюдается нагрев проводника благодаря выделению джоулева тепла. Изменение температуры влияет на электрическое сопротивление, что, в свою очередь, приводит к другому значению электрического тока в системе. Таким образом, температура и величина электрического тока оказываются взаимозависимыми параметрами. В данной ситуации вместо одного уравнения требуется решать систему уравнений, где уравнения для температуры и плотности тока связаны зависимостью электрического сопротивления от температуры. Если далее применять разные зависимости для проводников и полупроводников, то характер всего процесса будет сильно зависеть от природы материала.

Развитие компьютерных инструментов сделало метод математического моделирования доступным для широкого круга инженеров и исследователей, когда не требуется досконального знания языков программирования и методов построения физико-математических моделей. Эта доступность

достигнута за счет использования *шаблонов* физических моделей, когда исследователь должен определить в первую очередь соответствующие физические параметры, как, например, теплофизические свойства материала/среды, потоки и значения зависимой переменной на границах расчетной области, нагрузку или связи в задачах по механике материалов. Математические уравнения автоматически выбираются в модели при выборе соответствующего шаблона и затем используются для решения задачи. Хотя такой подход значительно облегчает разработку модели, на пользователе всегда остается ответственность за правильный выбор параметров внутри расчетной области, а также на ее границах.

После выполнения расчета пакет предоставляет возможность проанализировать результаты путем визуализации полей значений зависимых переменных, изолиний/изоповерхностей, линий тока в гидродинамике и т.д. Для получения расширенных данных могут применяться операции интегрирования вдоль поверхности или контура. Данная возможность важна для расчета разнообразных интегральных характеристик объектов, как, например, коэффициент сопротивления тела при движении в вязких средах, сила нагрузки, оказываемой на элемент упругой конструкции или тепловой поток через заданную стенку теплообменника. Универсальность в определении уравнений и методах представления результатов позволяет исследовать мультифизические (содержащие несколько взаимосвязанных процессов) задачи в областях акустики, проектирования био- и химического производств, электромагнетизма, геофизики, микроэлектроники, квантовой механики, механики материалов, процессов переноса и многих других. Таким образом, освоение метода мультифизического моделирования на примере лазерной обработки материалов позволяет использовать этот подход для анализа и других проблем.

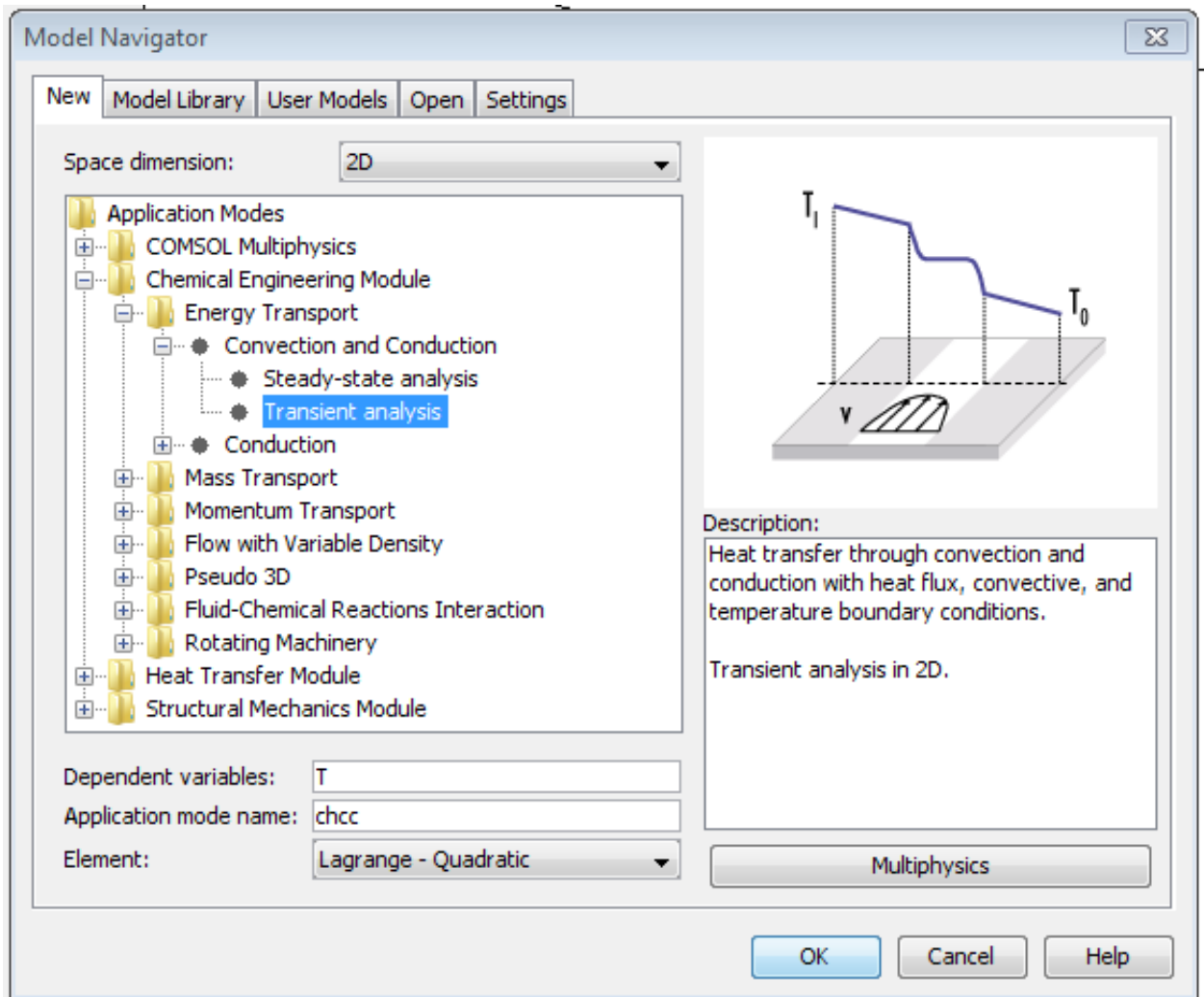


Рис. 3.1. Экранная форма “Выбор геометрии расчетной области и шаблона физической модели”.

Основные этапы составления модели, выполнения вычислений и анализа результата в пакете Comsol MultiPhysics можно представить схемой:

1. **Анализ физических и химических явлений в задаче.** Большинство задач сводятся к законам сохранения/изменения набора зависимых переменных $\{u_i\}$, где под зависимыми переменными понимаются функции, например, температуры, давления, скорости течения от независимых переменных. Здесь и далее в тексте под независимыми переменными понимаются пространственные координаты $\{x_i\}$ и

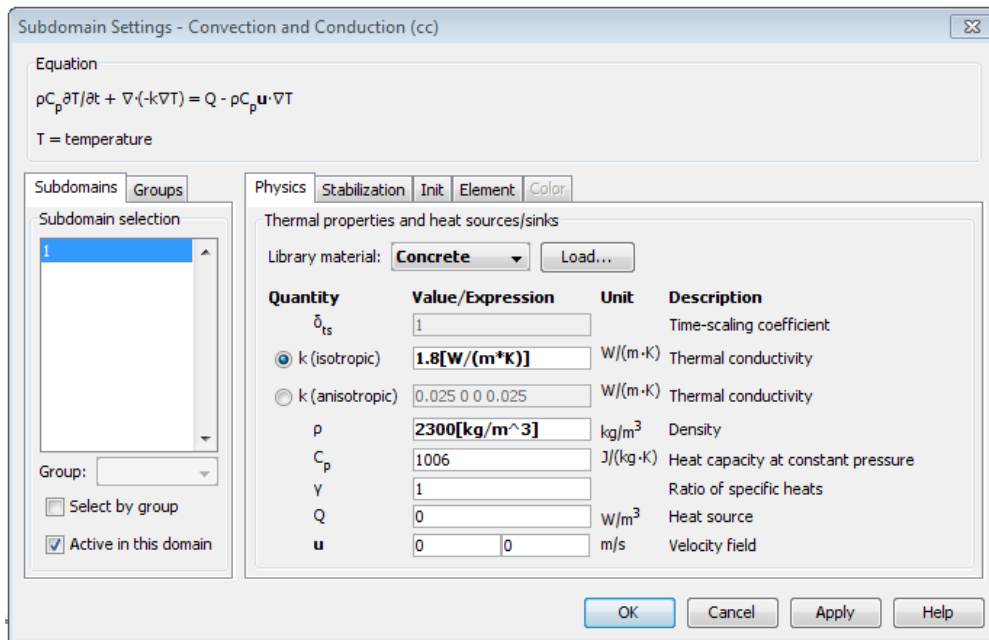


Рис. 3.2. Экранная форма “Выбор уравнений модели в расчетной области”.

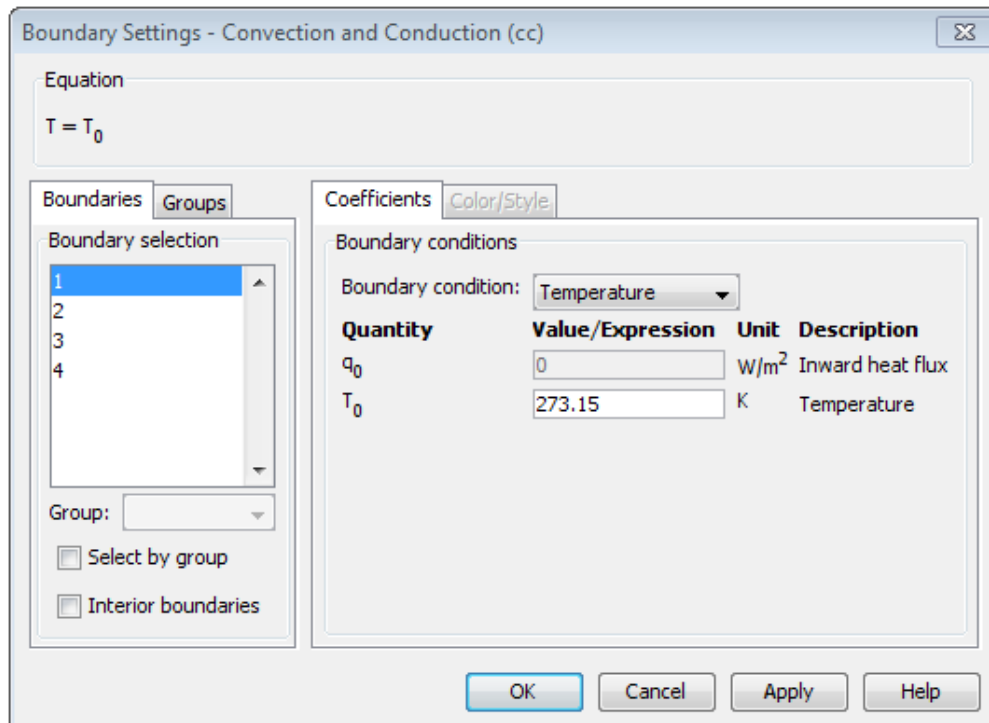


Рис. 3.3. Экранная форма “Выбор уравнений модели на границах”.

время t . При анализе важно установить общие закономерности явления, взаимосвязь зависимых переменных между собой. Если какая-то из величин сохраняется, то это накладывает на получаемое решение ограничение, упрощающее в конечном итоге решение задачи.

2. **Выбор геометрической размерности задачи.** При создании новой модели в навигаторе моделей требуется выбрать размерность задачи среди вариантов $1D$, $2D$, $3D$, $1D\ axial$ и $2D\ axial$, рис. 3.1. Три первых опции соответствуют одно-, дву- и трехмерным задачам. Следует отметить, что эта размерность определяет только симметрию задачи, но ни в коем случае не размерность пространства, в котором наблюдается явление. Поясним это на примере расчета температуры в стене, на одной поверхности которой поддерживается постоянная (комнатная) температура, а на другой поверхности — уличная температура. Если толщина стены много меньше ее поперечных размеров, то можно утверждать, что профиль распределения температуры внутри стенки не будет зависеть от координат исследуемых точек вдоль стены. Температура будет зависеть от расстояния до внутренней и внешней поверхностей, т.е. от координаты вдоль направления, перпендикулярного поверхности стены. Во всех плоскостях, параллельных плоскости стены, температура будет одинакова между внутренней и внешней стенками. Такая ситуация характеризуется наличием трансляционной симметрии решения в двух направлениях. Следовательно, достаточно решить уравнение, зависящее только от одной пространственной переменной, т.е. в $1D$ геометрии. Аналогично задачи с трансляционной симметрией в одном направлении могут решаться в $2D$ геометрии. Если задача не обнаруживает ни одного из видов трансляционной симметрии, то ее следует решать в $3D$ геометрии. Другой тип симметрии задачи и решения определяется вращательной симметрией. Напри-

мер, распределение тепла в однородном цилиндрическом проводнике не зависит от полярного угла и положения точки вдоль оси, а зависит только от расстояния до оси проводника. В этом случае требуется использовать режим *1D axial*. Наконец, если решение не зависит от полярного угла, но меняется при смещении вдоль оси, то этот случай моделируется с использованием *2D axial* геометрии.

3. **Выбор физической модели/моделей.** Физическая модель определяет зависимую переменную и тип дифференциального уравнения. Физические модели (application modes) сгруппированы по модулям, рис. 3.1. Модуль “Comsol MultiPhysics” содержит набор базовых физических моделей во всех областях. Модули теплопереноса “Heat Transfer Module”, химических технологий “Chemical Engineering Module”, механики материалов “Structural Mechanics Module” содержат специализированные шаблоны, сгруппированный для каждой предметной области. Внутри каждого модуля модели разбиты по группам, нацеленным на решение определенного класса задач, например, по тепло- и массопереносу, гидродинамике, механике материалов т.д. Последним этапом является выбор стационарной (не зависящей от времени) или нестационарной (зависящей от времени) модели. Если на этом этапе известны дополнительные физико-химические процессы, присутствующие в исследуемой проблеме, то они могут быть сразу добавлены для получения мультифизичной модели. Если эта информация отсутствует, то расширение модели может быть произведено позже. Выбор модели автоматически определяет набор u_i зависимых переменных, которые входят в уравнения модели. Для расчета трехмерных течений вязких сред это будут u, v, w, p — три компоненты вектора скорости течения и давление соответственно.

4. **Геометрическое моделирование расчетной области.** При решении любой задачи всегда ставится цель поиска решения в некоторой расчетной области. Как правило, размер и форма расчетной области естественным образом определяются исследуемой проблемой. Например, если исследуется течение жидкости в некотором сегменте гидравлической системы, то стенки системы ограничивают расчетную область только внутренней полостью системы, где изучается поле скоростей течения. Другие задачи, напротив, предполагают поиск решения в бесконечных или полубесконечных областях. В данном случае выбирается расчетная область конечного размера, но на границах этой области задаются граничные условия, имитирующие решение для (полу)бесконечной геометрии. Геометрическое моделирование расчетной области осуществляется с помощью набора примитивов, таких как прямоугольник, эллипс, точка, ломаная, кривые Безье 2 и 3 порядков в 2D расчетной области. В 3D области имеются трехмерные аналоги этих примитивов. Комбинируя использование различных примитивов, удастся построить сложные объекты с многочисленными гранями и поверхностями. После построения геометрии расчета требуется произвести генерацию конечно-элементной сетки, которая разбивает расчетную область на множество небольших конечных элементов, описывающих решение задачи в выбранных точках, называемых узлами. Эта операция в литературе часто определяется как операция дискретизации, когда происходит переход от поиска решения в непрерывно изменяющейся области независимых переменных к решению задачи только в выбранном множестве точек — узлах. При визуализации вычислительная сетка “покрывает” расчетную область неравномерно, образуя сгущение углов вблизи границ или углов, где решение меняется быстрее, чем это происходит вдали от границ. Генерация эф-

фективной сетки является большим искусством, но используемые в Comsol алгоритмы достаточно универсальны и дают хороший для первого приближения результат.

5. **Определение физических параметров процессов и граничных условий.** Выбор физической модели или моделей в п. 3 определяет уравнения и соответственно физико-химические законы, используемые при решении задачи. Тем не менее, следует задать физико-химические параметры, такие как плотность ρ , вязкость η , силу давления p , чтобы решение соответствовало именно той системе/процессу, которые изучаются в работе. Часто теплофизические параметры зависят от температуры и давления. Учет этих зависимостей производится автоматически, если использовать библиотеку материалов. Для этого во вкладке *Subdomain Settings* производится загрузка параметров для выбранного материала, рис. 3.2. Следует отметить, что расчетная область может содержать несколько подобластей (subdomains), представленных разными материалами. В этом случае осуществляется выбор соответствующих параметров для каждой подобласти. Вторым принципиально важным шагом является определение граничных условий на каждой из границ расчетной области, рис. 3.3. Как известно из теории задач в частных дифференциальных производных [87], единственное решение дифференциального уравнения существует только при выборе граничных условий I, II или III рода. В пакете Comsol они обозначены как граничные условия Дирихле, условия Неймана и обобщенные условия Неймана соответственно. Выбор граничного условия производится на основе анализа физических условий, возникающих на каждой из границ расчетной области. Граничные условия Дирихле (I рода) $u = f(\vec{r}, t)$ определяют значение зависимой переменной u как функцию независимых переменных (координат

и времени). Граничные условия Неймана (II рода) $\nabla u = g(\vec{r}, t)$ задают плотность потока изучаемой величины, например, потока заряда, массы и тепловой энергии, как функцию независимых переменных. Из физических законов плотность потока часто пропорциональна градиенту зависимой переменной, поэтому в модели может задаваться как сама плотность потока, так и производная вдоль направления, перпендикулярного границе. Условия III рода $h(u, \nabla u) = s(\vec{r}, t)$ содержат как саму зависимую переменную, так и ее градиент, что определяет распространенный механизм обмена, когда поток зависит от разности значений переменной на границе и вне расчетной области.

6. Численное решение задачи. После выполнения предыдущих пунктов реализуется этап вычислений, который позволяет получить решение задачи в зависимости от независимых переменных. Для стационарных задач такое решение не меняется во времени, и поэтому оно одно. Для нестационарных задач рассчитывается набор решений, каждое из которых соответствует определенному моменту времени. Процесс решения нередко сопровождается ситуацией отсутствия сходимости решения, когда решение не может быть получено или его точность ниже ожидаемого предела. В таком случае требуется критически проанализировать уравнения модели, выбор параметров и граничных условий. Если такая проверка не устраняет проблемы, то следует дискретизировать расчетную область сеткой с меньшими конечными элементами или повысить порядок интерполяционных функций.

7. Визуализация и анализ результатов. Результатом решения, как правило, являются скалярные или векторные поля, определяемые значениями зависимых переменных в узлах сетки. За счет использования метода интерполяции удастся определять значения исследуемой функции не только в узлах, но также в произвольной точке расчетной

области. Визуальное представление результатов с помощью цветовой шкалы позволяет быстро проанализировать значения функции в различных точках исследуемой области (см. пример расчета тепловых полей при лазерной обработке на рис. 3.6). Изолинии/изоповерхности графически представляют скорость изменения функции, когда линии расположены вблизи точек с высоким значением градиента. Критическое или циклическое поведение системы нередко наблюдается вблизи точек минимума и/или максимума. Этап анализа результатов является наиболее важным с точки зрения практической ценности результатов: последующего сопоставления с экспериментальными данными, объяснения закономерностей процесса, изменения параметров или геометрии устройства.

8. **Уточнение модели.** Получение искомого решения проблемы может произойти не с первой попытки. Иногда требуются серии расчетов при различных значениях параметров. Такие расчеты и сравнение с имеющимися экспериментальными и аналитическими моделями позволяет проверить степень адекватности модели, т.е. выяснить, насколько точно модель описывает исследуемое явление и его физические характеристики. Проверку модели при условиях/параметрах, соответствующих натурным или теоретическим данным, необходимо рассматривать как необходимый элемент процесса математического моделирования.

Описание приемов работы с пакетом Comsol MultiPhysics содержится в технической документации данного программного продукта [88]. Руководство “Quick Start and Quick Reference” описывает основные навыки работы с пакетом и позволяет понять принципы построения моделей. Руководство “User’s Guide” подробно раскрывает все этапы разработки моделей, описанные выше.

3.2. Расчет тепловых полей при лазерной обработке сплошных и пористых сред

3.2.1. Физико-математическая модель теплопереноса в пористых системах

Математическая модель теплопереноса в пористых средах с фазовыми переходами сформулирована для описания процессов высокоскоростного оплавления порошкового слоя бинарных металлических сплавов с перитектическим превращением. Моделирование нестационарных тепловых полей выполнено с помощью модели двухфазной зоны [100, 103, 120], расширенной на случай высоких скоростей нагрева среды и перенос тепла по механизмам теплопроводности и радиации. При формулировке системы уравнений были использованы следующие физические допущения:

- скорости охлаждения сплава $V_c > 10^3$ К/с, поэтому при описании кинетики затвердевания на макроскопическом масштабе пренебрегается зональной ликвацией компонентов. Следовательно, обосновано использование теплового уравнения квазиравновесной зоны;
- при наблюдаемых скоростях охлаждения перитектическая реакция подавлена, поэтому при $T < T_P$, где T_P — температура перитектической кристаллизации, перитектическая фаза образуется непосредственно из жидкости;
- механизмы теплопереноса учитывают: (а) теплопередачу по диффузионному механизму, (б) проникновение в пористую среду лазерного излучения на стадии нагрева, (в) испарение металла с поверхности образца, (г) радиационное охлаждение поверхности, (д) выделение скрытой теплоты фазового перехода.

С учетом принятых допущений уравнение теплопроводности может быть сведено к тепловому уравнению модели двухфазной зоны [100, 103]:

$$\Psi(T) \frac{\partial T}{\partial t} = a(\varepsilon_V, \varepsilon_\sigma) \nabla^2 T + F(q_L), \quad (3.1)$$

где Ψ — безразмерная эффективная теплоемкость, учитывающая выделение скрытой теплоты фазового перехода; T — абсолютная температура; t — время; a — коэффициент температуропроводности; ε_V и ε_σ — характеристики пористости порошкового слоя, определяемые как объемная доля пор и доля пор в плоском сечении соответственно; $F = \alpha q_L$ — интенсивность объемного источника тепла, связанная с мощностью лазерного воздействия на различной глубине y порошкового слоя. Здесь q_L и α — плотность потока энергии лазерного излучения и коэффициент поглощения светового излучения в локальном объеме порошкового слоя соответственно. Коэффициент α зависит как от температуры, так и фазового состава локального объема, определяя в модели изменение глубины проникновения лазерного излучения при оплавлении частиц и изменении морфологии пористого тела. Поскольку в работе не удалось измерить эту зависимость экспериментально, было выбрано оценочное значение $\alpha = \text{const}$ на основании данных о глубине спеченного слоя при различных режимах обработки. Геометрия расчетной области Ω представлена на рис. 3.4, где порошковый слой и подложка представлены подобластями Ω_P и Ω_S . Поглощение при проникновении лазерного излучения в вещество характеризуется законом, функционально близким к закону Бугера для оптически однородных сред, записанным для выбранной системы координат (рис. 3.4) в виде:

$$q_L(t, x, y) = q_{L0}(t, x)|_{y=0} \exp(-\alpha y), \quad (3.2)$$

где $q_{L0}(t, x)|_{y=0}$ — плотность потока энергии облучения на поверхности образца. Зависимость температуропроводности от пористости вычислялась

уравнением, сходным с подходом [101]:

$$a = a_0 \frac{1 - \varepsilon_\sigma}{1 - \varepsilon_V}, \quad (3.3)$$

где a_0 — температуропроводность сплошной среды.

Функция Ψ безразмерной теплоемкости в общем виде определяется выражением $\Psi(T) = 1 + \theta (dS/dT)$, где θ — адиабатическая температура, S — объемная доля жидкой фазы в локальном объеме, теплоемкость которого вычисляется. В работе использовалось выражение для Ψ , полученное авторами [103] в приближении малой зональной ликвации примесных компонентов:

$$\Psi = 1 - \frac{\theta}{(1 - k)C\varphi'(C)} \exp \left\{ - \int_{C_0}^C \frac{dC}{(1 - k)C} \right\}. \quad (3.4)$$

где C — концентрация примесного (неосновного) компонента, $k = C_S/C_L$ — коэффициент распределения, получаемый из фазовой диаграммы и равный отношению концентраций C_S и C_L на границе раздела “твердая фаза” — “расплав”, $T_L = \varphi(C)$ — уравнение, описывающее зависимость температуры ликвидуса T_L (линии фазового равновесия, определяемой диаграммой состояния сплава) от концентрации. Для линейной фазовой диаграммы температура ликвидуса задается $T_L = T_A + mC$, где T_A — температура кристаллизации основного компонента, m — тангенс угла наклона линии ликвидус. При больших скоростях движения фронта затвердевания, наблюдаемых в экспериментах по лазерному оплавлению, необходимо учитывать релаксационные процессы в диффузионном переносе примеси и зависимости k и m от степени отклонения от термодинамического равновесия как на поверхности раздела, так и в объеме расплава [98]. В данной работе использовались равновесные значения параметров k и m , полученные из равновесных фазовых диаграмм [117]. Расширение модели с учетом локально-неравновесной диффузии является предметом дальнейших исследований.

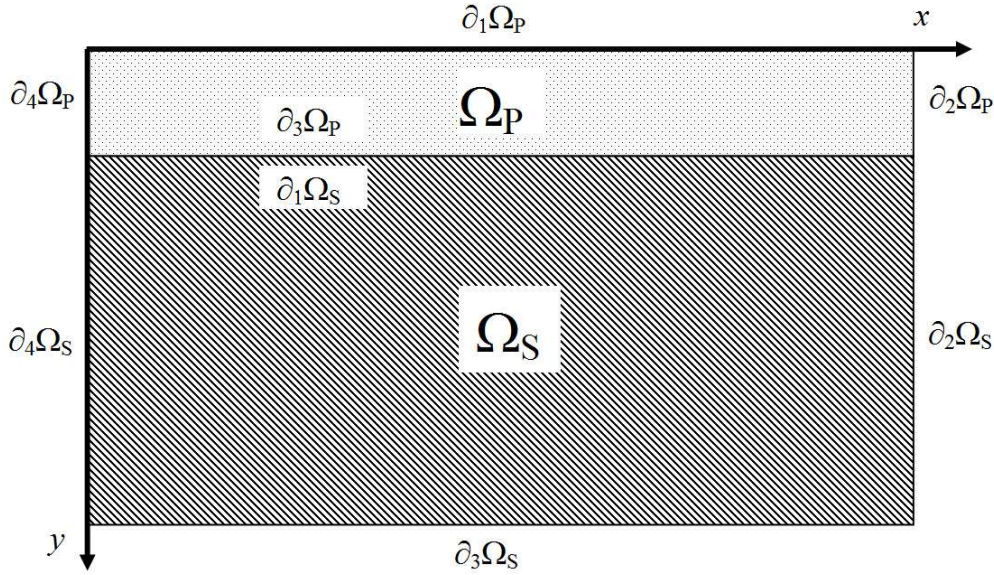


Рис. 3.4. Расчетная область Ω разбита на две подобласти Ω_P и Ω_S , соответствующие порошковому слою и подложке. Граничные условия определяются уравнениями (3.5)–(3.12).

Учет теплового воздействия лазерного излучения в уравнении (3.1) производится объемным источником F , зависящим от потока $q_L(t, x, y)$, определяемого, в свою очередь, потоком $q_{L0}(t, x)$ тепла на поверхности образца в уравнении (3.2). Функция $q_{L0}(t, x)|_{y=0}$ задается периодической по времени и зависящей от пространственных координат функцией, отражающей как импульсный характер лазерного излучения, так и распределение плотности излучения внутри лазерного луча:

$$q_{L0}(t, x)|_{y=0} = \frac{P_{act}}{R_b} g(x) \xi(t), \quad g(x) = g_u(x) \text{ или } g_n(x), \quad (3.5)$$

$$g_u(x) = (1/2)H(|x - X_b| - R_b), \quad (3.6)$$

$$g_n(x) = \frac{R_b^2}{(2\pi\sigma_b^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x - X_b)^2}{2\sigma_b^2}\right), \quad (3.7)$$

$$\xi = H(\tau_2 - t \bmod \tau_1). \quad (3.8)$$

где P_{act} — фактическая мощность облучения поверхности, $g(x)$ — функция распределения плотности потока в лазерном луче, ξ — функция П-образной модуляции лазерного излучения, R_b , V_b , X_0 и $X_b = X_0 + V_b t$ — радиус, ско-

рость, начальное положение и текущая координата центра лазерного пучка соответственно, σ_b — стандартное отклонение, τ_1 и τ_2 — время (период) между импульсами и продолжительность одного импульса, H — функция Хэвисайда. Функция g задается в виде однородного или Гауссова распределения выбором функций g_u или g_n соответственно в зависимости от характеристик системы фокусировки. Нормировка функции g осуществляется из условия, что 90% мощности лазерного излучения приходится на элемент поверхности, ограниченный эффективным радиусом R_b лазерного луча. На рисунке 3.5 представлены графики функций ξ , g_u и g_n , модулирующих тепловой поток относительно временной и пространственных координат.

На поверхности $\partial_1\Omega_P$ образца происходит конвективное и радиационное охлаждение в соответствии с [105]

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}|_{\partial_1\Omega_P} = h_{\text{эфф}}(T - T_{\text{окр}}) + \epsilon\epsilon_{SB}(T^4 - T_{\text{окр}}^4), \quad (3.9)$$

где ϵ — коэффициент поверхностной эмиссии, $\epsilon_{SB} = 5.67 \times 10^{-8} \text{ Вт м}^{-2} \text{ К}^{-4}$ — константа Стефана-Больцмана, $T_{\text{окр}}$ — температура окружающей среды, а вектор нормали \mathbf{n} направлен от порошкового слоя в газовую среду. Испарение металла с поверхности учтено в модели посредством эффективного коэффициента $h_{\text{эфф}}$ теплообмена:

$$h_{\text{эфф}}(T) = h_{\text{конв}} + (1/2)(h_{\text{кип}} - h_{\text{конв}}) \tanh((T - T_{\text{кип}})/\Delta T_h), \quad (3.10)$$

где переход от конвективного охлаждения поверхности, определяемого коэффициентом $h_{\text{конв}}$ теплообмена за счет конвекции в газовой среде, к охлаждению за счет испарения, определяемого $h_{\text{кип}}$, происходит вблизи температуры кипения $T_{\text{кип}}$ в интервале температур ΔT_h . Учетом $h_{\text{конв}}$ от скорости продувки камеры в дальнейшем может быть уточнен теплообмен при лазерной обработке в инертной среде. Граничные условия на нижней поверхности подложки задаются

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}|_{\partial_3\Omega_S} = h_{\text{конв}}(T - T_{\text{окр}}). \quad (3.11)$$

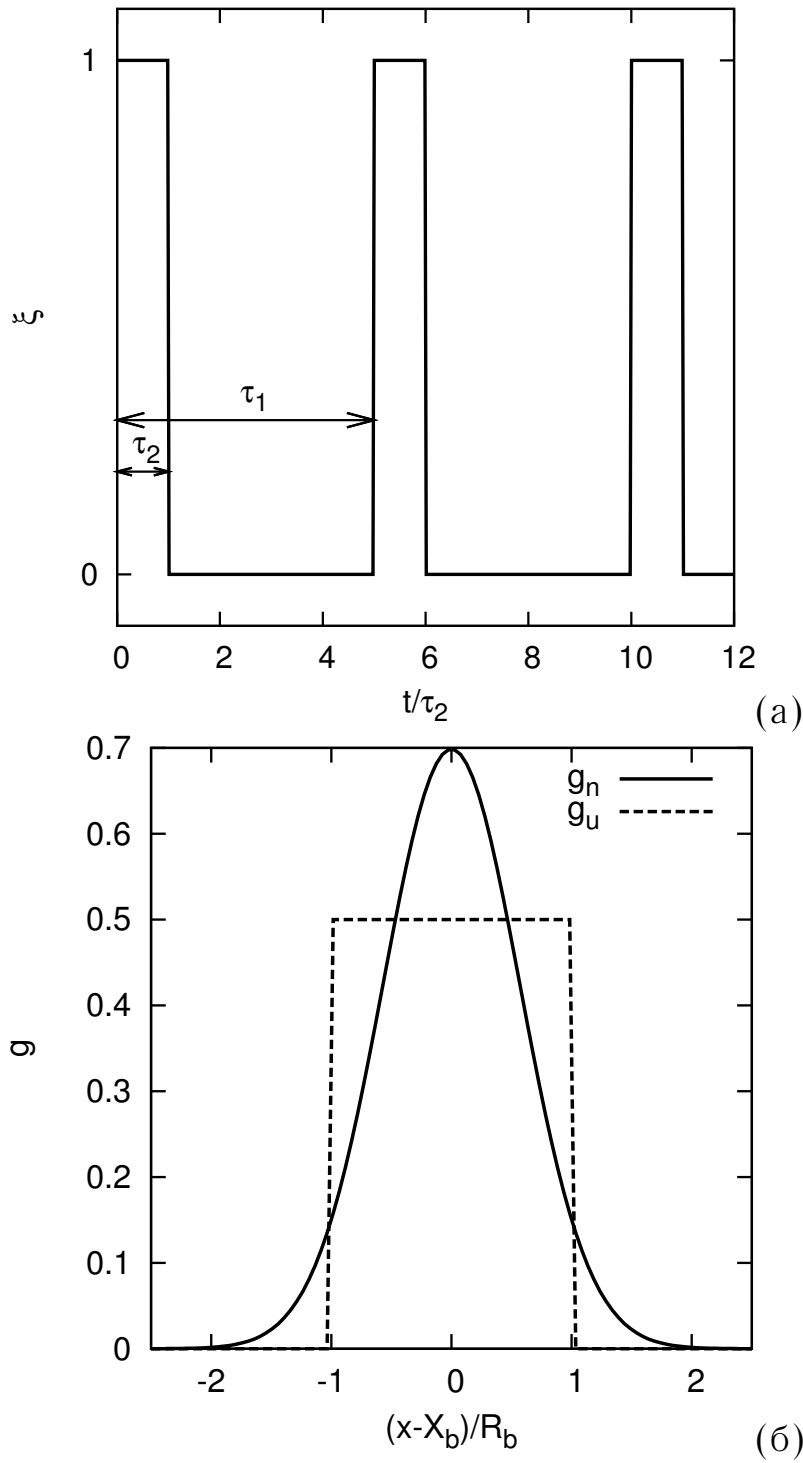


Рис. 3.5. (а) Модулирование потока лазерного луча при импульсной обработке функцией ξ , зависящей от безразмерного времени t/τ_2 , где τ_1 и τ_2 — время (период) между импульсами и продолжительность одного импульса соответственно. (б) Распределение g плотности теплового потока как функция безразмерного расстояния $(x - X_b)/R_b$ от центра лазерного луча. Функция g может задаваться в виде однородного g_u или нормального g_n распределения.

Граница раздела порошкового слоя и подложки характеризуется непрерывностью температуры и теплового потока:

$$T|_{\partial_3\Omega_P} = T|_{\partial_1\Omega_S}, \quad k(\partial T/\partial n)|_{\partial_3\Omega_P} = k(\partial T/\partial n)|_{\partial_1\Omega_S}. \quad (3.12)$$

На вертикальных границах $\partial_2\Omega_P$ и $\partial_4\Omega_P$ порошкового слоя и границах $\partial_2\Omega_S$ и $\partial_4\Omega_S$ подложки задаются периодические граничные условия, аналогичные уравнениям (3.12), когда температура и потоки на противоположных границах приравниваются для уменьшения расчетного времени. Начальные условия принимаются в виде

$$T|_{\Omega_P, \Omega_S} = T_{\text{нач}}, \quad (3.13)$$

где $T_{\text{нач}}$ — температура, до которой предварительно нагрет образец.

Таким образом, система уравнений (3.1)–(3.13) описывает процесс импульсной лазерной обработки порошкового слоя и является замкнутой. Численная модель была реализована в коммерческом вычислительном пакете Comsol MultiPhysics, предназначенном для решения физических и инженерных задач. Нестационарное уравнение теплопроводности для поставленной краевой задачи рассчитывалось методом конечных элементов.

3.2.2. Принципы построения компьютерной модели

Как отмечено выше, в расчетах мы переходим от рассмотрения явления в неограниченном пространстве к его изучению в пределах некоторой расчетной области с конечными размерами, характеризуемой наличием объемной части и границ, являющимися поверхностями в 3D, кривыми в 2D и точками в 1D задачах. Размеры расчетной области должны выбираться таким образом, чтобы по возможности максимально полно описать явление, выбирая расчетную область значительно больше масштабов изучаемого явления. Если это невозможно, то следует уделить внимание точности

задаваемых граничных условий, так как это, в конечном итоге, определяет погрешность получаемого решения.

При моделировании лазерной обработки характерным пространственным масштабом L является наибольшая протяженность области материала, подвергаемой нагреву в процесс облучения. Этот масштаб может быть определен на основании теоретических оценок, включающих мощность излучения, скорость сканирования и теплофизические свойства материала. Часто параметр L не меняется со временем, что позволяет исследовать такую проблему очень эффективно, переходя в движущуюся систему координат, связанную с центром лазерного пятна. Тем не менее, в ряде случаев может происходить увеличение параметра L в результате постепенного нагревания образца.

Вторая особенность построения компьютерной модели заключается в необходимости предварительной оценки временных масштабов процесса. Временной масштаб в модели лазерной обработки будет определяться двумя параметрами. Первый параметр — это время τ_2 воздействия излучения на вещество, которое значительно отличается для непрерывного и импульсного лазеров. В первом случае это период порядка сотен наносекунд, во втором случае — период бесконечно большой. Следовательно, при импульсной обработке модель должна выполнять расчеты с очень малым интервалом по времени во время действия лазерного излучения и с гораздо большим интервалом между лазерными импульсами. Такой гибкий алгоритм расчета достигается при использовании адаптивного шага по времени, уменьшающегося при возникновении “быстрых” и увеличивающегося при протекании “медленных” процессов. Вторым параметром, определяющим шаг по времени, это характерное время $\tau_{\text{тп}}$ распространения теплового поля в пределах пространственного масштаба L . Этот параметр зависит от коэффициента температуропроводности, если теплоперенос осуществляется по

механизму диффузии (т.е. теплопроводности), как это происходит в твердых телах. При рассмотрении теплопереноса в жидких и газообразных системах часто более существенное влияние оказывает конвекция, определяемая скоростью течения среды.

3.2.3. Параметры управления лазерным спеканием

Управление лазерным спеканием осуществляется с помощью параметров, приведенных в табл. 3.1 [119]. В списке управляющих параметров приведены как варьируемые параметры процесса, определяемые режимами обработки и способом подготовки порошка, так и теплофизические параметры, зависящие от свойств конкретной порошковой смеси или характеристик установки. Далее проанализируем влияние первой группы параметров, состоящей из: 1) фактической мощности излучения P_{act} , 2) частоты генерации f , 3) радиуса пятна R_b , 4) скорости движения луча V_b , 5) коэффициента поглощения α .

Мощность P_{act} подбирается в зависимости от температуры кипения материала порошка, коэффициента температуропроводности, формы и среднего размера частиц, чтобы предотвратить горение образца. Мощность излучения оказывает определяющее значение на динамику плавления частиц. Количественно это характеризуется количеством жидкой фазы, образовавшейся в результате действия импульса. Оптимальное значение мощности эмперически подбирать крайне сложно, т.к. необходимо достигать состояния, при котором количество жидкой фазы в порошковом слое составляет около 15%, но при этом недопустим перегрев расплава, приводящий к образованию кипящего слоя.

Расчеты не выявили существенного эффекта частоты f на процесс сплавления частиц, поскольку период импульсов много меньше характерного времени релаксации теплового поля. Фактически частота определяет

количество импульсов излучения, приходящихся на одну точку порошкового слоя при заданной скорости движения луча лазера, т.е. определяет количество подведенной энергии в порошковый слой. Однако следует учитывать специфические особенности генерации лазерного излучения. Частота следования импульсов оказывает влияние на распределение генерируемой мощности в течение импульса: с уменьшением частоты резко растет пиковое значение мощности. Заниженное значение частоты приведет к резкому перегреву области и интенсивному кипению поверхности порошка, при котором наблюдается существенное снижение доли образовавшейся жидкой фазы. Увеличение частоты приводит к более равномерному прогреву порошкового слоя, при этом резко сокращаются скорости нагрева и охлаждения образцов. Поверхность частиц уже не оплавляется, так как тепловая энергия эффективно отводится в объем образца. При этом также наблюдается сокращение доли образовавшейся жидкой фазы.

Скорость движения луча V_b в совокупности с частотой импульсов влияет на количество импульсов, приходящихся в одну точку. Фактически скорость сканирования выбирается, исходя из температуры плавления компонентов: для более тугоплавких материалов необходимо уменьшать скорость сканирования и, наоборот, для легкоплавких материалов — увеличивать. Расчеты показали интересную зависимость глубины l спеченного слоя от величины V_b . Изменение скорости в диапазоне от 50 до 150 мм/с приводит к уменьшению l с 95 до 50 микрон. При этом продольный размер зоны оплавления на поверхности порошкового слоя снижается с 225 до 150 мкм. Таким образом, скорость сканирования является эффективным методом управления параметрами процесса, поскольку позволяет изменять условия спекания порошка и, соответственно, скорости кристаллизации, что оказывает влияние на окончательную микроструктуру образца.

Коэффициент α характеризует глубину проникновения излучения в порошковый слой и зависит от гранулометрического состава частиц и плотности насыпки. Этот параметр в конечном счете определяет окончательную пористость образовавшегося слоя. Коэффициент α проникновения позволяет изменять глубину l в диапазоне от 80 до 140 мкм при $V_b = 50$ мм/с. Тем не менее, этот параметр зависит от пористости подготовленной смеси и коэффициента поглощения излучения поверхностью частиц порошка, т.е. от параметров, плохо регулируемых экспериментально. По этой причине оптимальным является использование V_b в качестве основного управляющего параметра, а величина α должна обязательно включаться в модель управления в качестве свободного параметра, оцениваемого из экспериментальных данных.

3.2.4. Анализ градиентов температуры и скоростей охлаждения в зоне лазерного воздействия

Расчеты были выполнены для сплава с химическим составом Fe-5 вес.%Ni. Отличительной особенностью системы Fe-Ni является крайне малая разница температур ликвидуса и солидуса во всем интервале концентраций. Это приводит к значительным трудностям при математическом описании процесса лазерной закалки, характеризуемого высокими градиентами температур в пористой среде. Рисунок 3.6 показывает положение изотерм при облучении поверхности образца одиночным импульсом. Во время облучения (рис. 3.6а) происходит нагревание слоя порошка благодаря высокому, по сравнению с непрерывной средой, проникновению излучения. Это связано с эффектом дифракции лазерного излучения с длиной волны ~ 1 мкм на квазипериодической структуре с характерным размером структурных элементов в диапазоне 1-10 мкм. В результате формируется зона с высокими температурными градиентами вблизи границы лазерного

Таблица 3.1. Управляющие параметры лазерной обработки

№	параметр, размерность	обозн.	значение
1	мощность лазерного излучения, Вт	P_{act}	10
2	частота генерации импульсов, кГц	f	32
3	эффективный радиус зоны лазерного воздействия, мкм	R_b	10
4	скорость движения луча, см/с	V_b	10
5	продолжительность одиночного импульса, нс	τ_2	100
6	максимальная плотность потока энергии во время импульса, Вт/м ²	J_0	$1,5 \times 10^{13}$
7	температура окружающей среды, К	$T_{окр}$	293
8	коэффициент поверхностной эмиссии	ϵ	0,4
9	коэффициент поглощения излучения в объеме порошка, 1/м	α	5×10^4
10	конвективный коэффициент теплопередачи на внешней поверхности порошкового слоя, Вт/(м ² К)	$h_{конв}$	50
11	эффективный коэффициент теплоотдачи на поверхности при кипении расплава, Вт/(м ² К)	$h_{кип}$	10000

луча. В течение второй половины лазерного импульса (рис. 3.6б) модель предсказывает нагрев до температуры плавления $T_L=1784$ К с образованием зоны плавления. Высокая мощность излучения приводит к нагреванию поверхностного слоя до температуры кипения $T_{\text{кип}}=3100$ К, при которой резкое увеличение теплоотвода на поверхности за счет испарения вещества препятствует дальнейшему росту температуры. Так как достигается значительный перегрев приповерхностной области выше температуры плавления (рис. 3.6б), то теплоотвод в подложку приводит к подплавлению частиц порошка в объеме порошкового слоя и формированию связного каркаса. Дальнейшее остывание области реализуется медленно, так как время релаксации температурного поля $\tau_{\text{релак}}$ сопоставимо с временем следования импульсов τ_1 . Это создает условия для осуществления непрерывного плавления слоя порошка импульсным лазерным излучением, если скорость сканирования $V_b \sim R_b/\tau_1$.

Результат расчета положения фронта затвердевания вдоль оси лазерного луча после одиночного импульса показан на рис. 3.7. При $t < \tau_2$ облучения наблюдается скорость движения фазовой границы $V > 1$ м/с. Данное высокое значение скорости объясняется не только большой мощностью облучения, но и эффективным проникновением лазерного излучения в пористую среду. Благодаря этому происходит предварительный разогрев порошкового слоя, и движение изотермы $T=T_L$ в дальнейшем реализуется со значительными скоростями. После достижения фронтом оплавления глубины $Y_{\text{max}} = 35$ мкм фронт затвердевания начинает двигаться в обратном направлении к поверхности образца с ускорением, и его положение описывается $Y \sim Y_{\text{max}} - \lambda\sqrt{t}$. Ускорение обусловлено интенсивным отводом тепла как в объем порошкового слоя, так и в газовую среду.

Изменение температуры во времени показывает на рис. 3.8а скачок T на поверхности $y = 0$ мкм до температуры кипения $T_{\text{boil}} = 3190$ К. Осты-

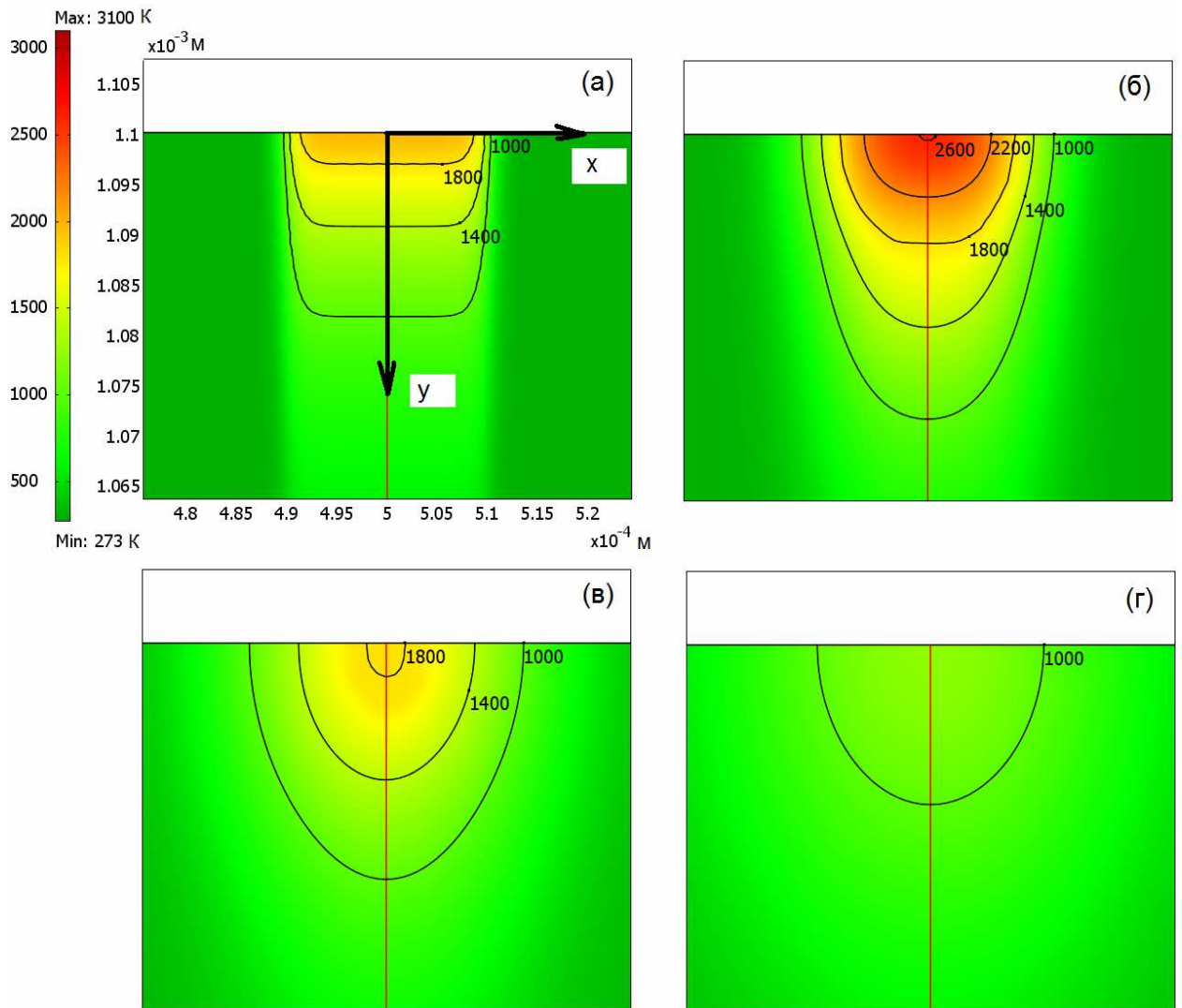


Рис. 3.6. Динамика изменения изотерм при облучении поверхности образца одиночным импульсом длительностью $\tau_2 = 100$ нс при однородном распределении плотности излучения в лазерном пучке. Безразмерное время t/τ_2 , отнесенное к длительности импульса, равно: а) 0,6, б) 5, в) 20, г) 50.

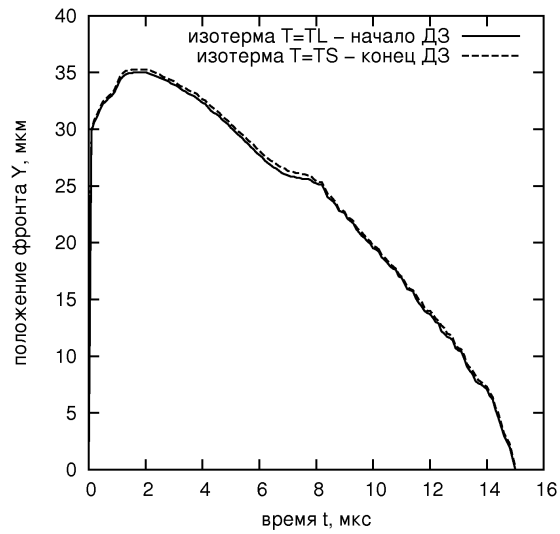


Рис. 3.7. Положение фронта затвердевания вдоль оси лазерного луча в зависимости от времени. Изотермы соответствуют температурам ликвидуса T_L и солидуса T_S .

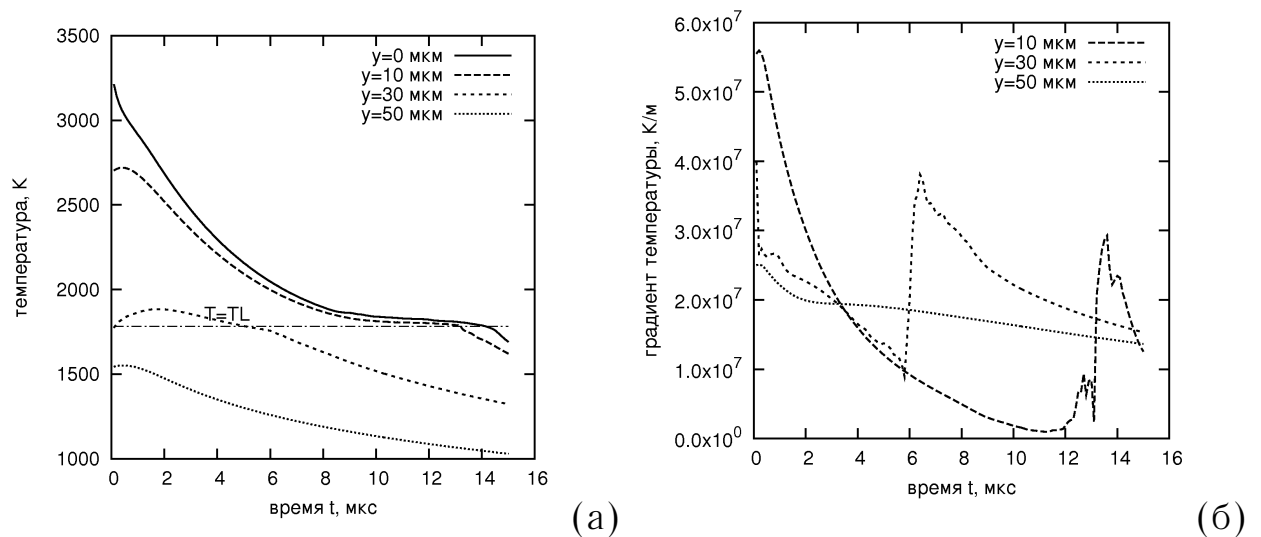


Рис. 3.8. Температура (а) и градиент температуры (б) как функции времени t и расстояния y от поверхности образца.

вание до температуры плавления происходит за 14 мкс, что соответствует времени τ_1 следования импульсов. Перегиб температурной кривой при $T = T_L$ свидетельствует о достаточно протяженном времени кристаллизации. С удалением от поверхности образца продолжительность нахождения точки в двухфазной зоне уменьшается. При $y \sim Y_{\max} = 30$ мкм точка находится на плато $T \sim T_L$ до 5 мкс.

Анализ изменения градиентов в контрольных точках (рис. 3.8б) показывает скачок градиента при приближении температуры к температуре плавления. Данный эффект связан с конечным временем нахождения контрольной точки в двухфазной зоне, где градиент температуры всегда значительно ниже, чем в точках перед фронтом кристаллизации. На основании анализа рис. 3.8 и 3.7 можно оценить характерные величины температурных градиентов и скоростей охлаждения в различных точках образца: градиент $|\text{grad}T|$ варьируется в интервале $10^7 - 5 \times 10^7$ К/м, а скорости V_c охлаждения достигают значений до 10^7 К/с.

3.3. Лабораторные работы по расчету лазерной обработки

№1. Анализ динамики движения фронта затвердевания (задача Стефана)

Цель работы: Изучение фазовых переходов I рода на примере задачи плавления полубесконечной среды.

Описание: К большому классу важных с практической точки зрения проблем относятся задачи, связанные с описанием фазовых переходов (превращений) I рода, когда среда испытывает переход от одного фазового состояния к другому с одновременным выделением или поглощением тепла. Такие явления зачастую наблюдаются в процессах плавления или кристаллизации, поэтому будем их рассматривать как распространенный пример

фазовых переходов I рода. Хотя анализ проводится на примере проблемы лазерной обработки, это не ограничивает применения результатов и выводов, которые будут получены, к больше широкому кругу задач.

Первая попытка решения этой задачи связана в научной литературе с работами Стефана конца XIX века, где исследовалась скорость образования полярного льда при поддержании на внешней поверхности льда постоянной температуры, равной температуре замерзания. В дальнейшем эта проблема получила название классической задачи Стефана. Важная особенность таких явлений кроется в наличии движущейся границы раздела фаз. Закон, описывающий движение границы, должен определяться из условия баланса тепловых потоков на границе и полной внутренней энергии материала образца. Поскольку на границе раздела происходит выделение или поглощение тепла, а теплофизические свойства фаз могут отличаться, то задача относится к нетривиальным проблемам. По этой причине существует ограниченный набор краевых задач, где найдены явные аналитические решения. В подавляющем большинстве случаев задача решается численно, а полученные решения сравниваются с экспериментальными данными.

Выполнение работы:

1. Запустите пакет Comsol MultiPhysics. Загрузите с диска модель “ЛР 1 - Изучение фазовых переходов I рода.mph”.
2. Откройте вкладку “Константы” (“Constants”), рис. 3.9. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Откройте вкладку “Уравнения в области” (“Subdomain settings”). Внимательно изучите дифференциальные уравнения для переменных

температуры T и энтальпии H . Как определяется вклад теплоты фазового перехода в общий тепловой баланс?

4. Откройте вкладку “Уравнения на границах” (“Boundary settings”). Внимательно изучите условия, задаваемые на обеих границах. Какой тип граничных условий задается на левой и правой границах? Объясните физический смысл записанных уравнений.
5. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Зарисуйте профиль на миллиметровке. Какая особенность присутствует в температурном профиле, рис. 3.10? С чем связано появление этой особенности?
6. Поменяйте значение скрытой теплоты кристаллизации (latent heat), увеличив его в 2 раза. Повторите расчет. Проанализируйте изменение решения при увеличении исследуемого параметра.
7. Задайте исходное значение скрытой теплоты кристаллизации. Поменяйте значение коэффициента температуропроводности (thermal diffusivity), увеличив его в 2 раза. Повторите расчет. Проанализируйте изменение решения при увеличении температуропроводности.

Вопросы для самоподготовки:

1. Чем характеризуются фазовые переходы I рода?
2. Дайте описание классической задачи Стефана.
3. Как формулируется закон Фурье?
4. Что такое скрытая теплота фазового перехода?

№2. Расчет тепловых полей при непрерывной обработке

Constants			
Name	Expression	Value	Description
a_p	k_p/Cp_m3_p	$(2.266995e-5)[m^2/s]$	Thermal diffusivity
Ts_p	$Tl_p-DeltaT_LS$	$1775.666667[K]$	Solidus temperature
Tl_p	$1784[K]$	$1784[K]$	Liquidus temperature
Cp_m3_p	$\rho_p \cdot Cp_kg_p$	$3.565513e6[J/(m^3 \cdot K)]$	Heat capacity per m ³
L_m3_p	$2.35e9[J/m^3]$	$2.35e9[Pa]$	Latent heat
DeltaT_LS	$m_e_p \cdot C0_p \cdot (k_e_p - 1) / k_e_p$	$8.333333[K]$	Equilibrium temperature interval of solidification
Tbound	$Tl_p + 200$	$1984[K]$	Temperature at the left boundary at $t > 0$
k_p	$80.83[W/(m \cdot K)]$	$80.83[W/(m \cdot K)]$	Thermal conductivity
m_e_p	$-5.00[K]$	$-5[K]$	Tangent of the equilibrium liquidus line
k_e_p	0.75	0.75	Equilibrium partition coefficient
C0_p	5	5	Nominal concentration
Cp_kg_p	$449.89[J/(K \cdot kg)]$	$449.89[J/(K \cdot kg)]$	Heat capacity per kg
rho_p	$7925.30[kg/m^3]$	$7925.3[kg/m^3]$	Density
Tamb_bc	$Tl_p - 200$	$1584[K]$	Ambient temperature

Рис. 3.9. лабораторной работы N1. Экранная форма секции “Константы”.

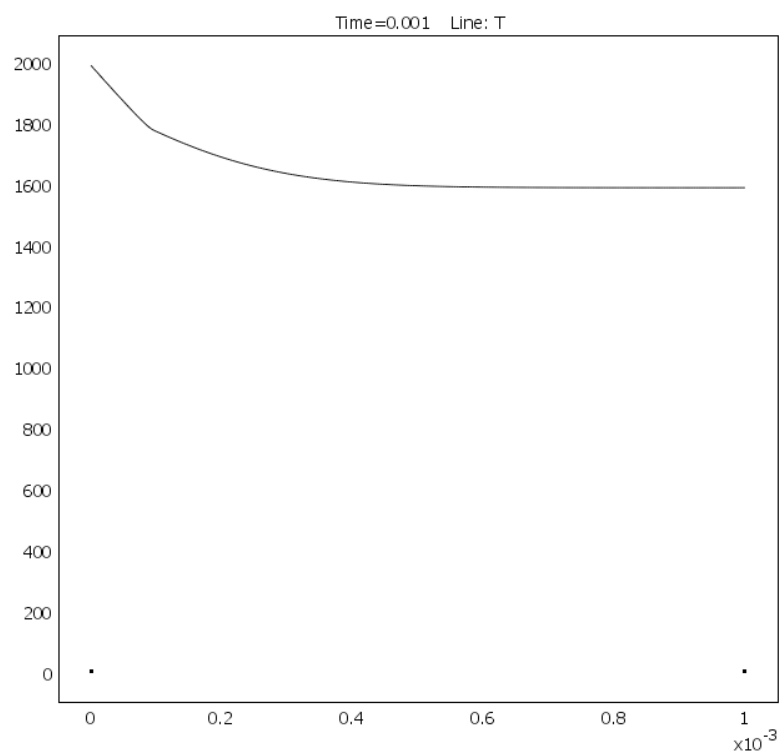


Рис. 3.10. Лабораторной работы N1. Профиль температуры в момент времени $t = 0.001$ с.

Цель работы: Изучить тепловые режимы обработки и поле температур при обработке поверхности стального образца непрерывным CO_2 лазером

Описание: Режим генерации импульсов в значительной мере определяет характер теплового воздействия на вещество, приводя к различным типам морфологии обработанного материала. Если источник лазерного излучения представляет собой непрерывный лазер, как правило, имеющий в качестве рабочего тела газовую среду (например, CO_2), то такой режим облучения дает постоянное во времени тепловой поток, поступающий к образцу. При мощности лазера 10 Вт характерная плотность мощности излучения составляет порядка 10^{10} Вт/(м² с), что достигается за счет малого, до 100 мкм, диаметра лазерного пятна. После начала обработки происходит нагрев поверхностного слоя образца до температуры выше температуры плавления. Поскольку плавление всегда сопровождается значительным поглощением тепла, то зона оплавления имеет размеры порядка нескольких десятков микрометров. На рис. 3.11 показана динамика изменения температуры в поверхностном слое образца с течением времени. Сразу после начала обработки температура в зоне обработки меньше температуры плавления, но температурный градиент вблизи центра пятна значителен. По мере роста зоны термического воздействия, обозначенного на рисунке изотермой с наименьшим из представленных значением 400 К, происходит формирование зоны оплавления, показанной на цветовой шкале красным цветом. После выхода на стационарный режим движение лазерного луча с постоянной скоростью приводит к перемещению зоны оплавления вдоль поверхности образца. При этом форма зоны оплавления несимметрична относительно центра луча и вытянута в направлении, противоположном скорости движения луча, рис. 3.12.

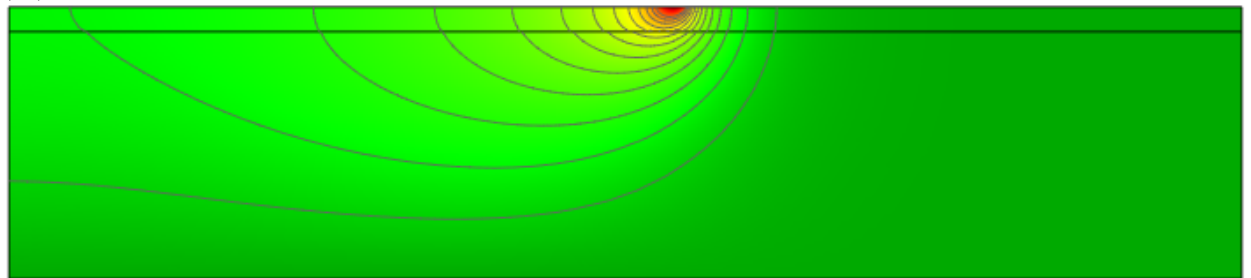
Выполнение работы:



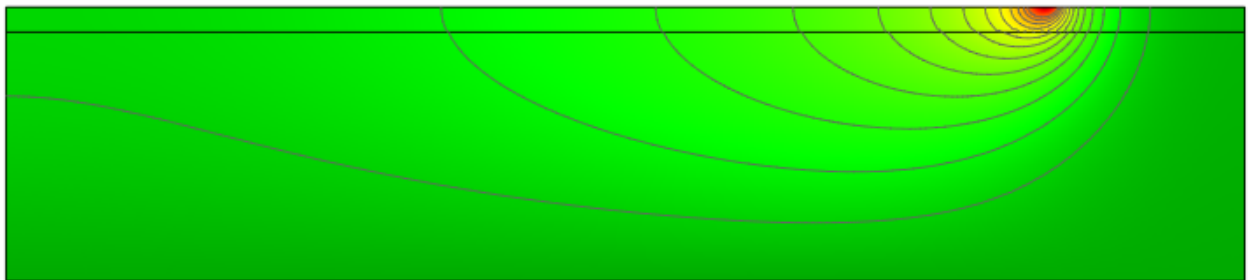
(a)



(б)



(в)



(г)

Рис. 3.11. Распределение температуры в поверхностном слое образца среднеуглеродистой стали при обработке непрерывным CO_2 лазером с номинальной мощностью 10 Вт при скорости сканирования 100 мм/с. Результаты приведены для моментов времени t : (а) 1 мс, (б) 10 мс, (в) 25 мс, (г) 40 мс. Время отсчитывается с момента начала обработки. Размер расчетной области $5 \times 1,1$ мм; изотермы соответствуют температурам от 400 до 1600 К с интервалом 100 К.

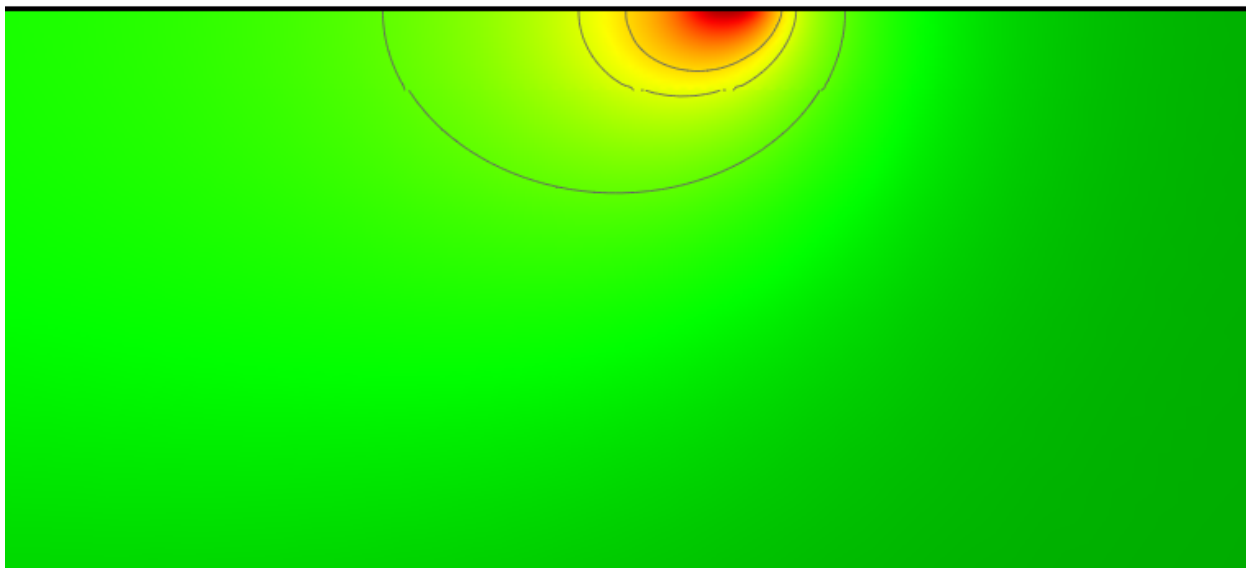


Рис. 3.12. Форма зоны оплавления при обработке непрерывным CO_2 лазером.

1. Запустите пакет Comsol MultiPhysics. Загрузите с диска модель “ЛР 2 - Обработка поверхности стали непрерывным лазером.mph”.
2. Откройте вкладку “Константы” (“Constants”), рис. 3.9. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Обратите внимание на параметры лазерной обработки, задаваемые в модели. Проанализируйте метод определения мощности лазерного излучения, радиуса и скорости лазерного луча, способ задания теплофизических параметров среды. Какому закону подчиняется распределение мощности внутри лазерного пучка?
4. Откройте вкладку “Уравнения на границах” (“Boundary settings”). Внимательно изучите условия, задаваемые на всех границах. Как реализуются периодические граничные условия на левой и правой границах?

5. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Схематически зарисуйте динамику изменения изотерм с течением времени в расчетной области.
6. Поменяйте значение скорости сканирования лазерного луча в два раза. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра.

Вопросы для самоподготовки:

1. Что такое непрерывный режим лазерной обработки?
2. Какова форма зоны оплавления?
3. Что происходит с поверхностным слоем, когда достигается температура плавления?
4. Может ли на поверхности достигаться температура больше, чем температура кипения?

№3. Расчет тепловых полей при импульсной обработке

Цель работы: Исследовать динамику изменения теплового поля после воздействия одиночного импульса на поверхность образца.

Описание:

При импульсном режиме генерации лазерного излучения высокие скорости движения лазерного луча приводят к локальному тепловому воздействию с управляемой в эксперименте периодичностью. В результате формирование зоны оплавления происходит только в момент действия импульса, имеющего продолжительность до 100 нс. После окончания импульса наблюдается релаксация теплового поля и охлаждение зоны воздействия за счет переноса тепла в объем образца диффузией, а также охлаждения на поверхности по конвективному и радиационному механизмам. После релаксации теплового поля происходит кристаллизация зоны оплавления,

заканчивающаяся до начала следующего импульса. В силу высоких скоростей охлаждения реализуется высокоскоростная кристаллизация, закалка поверхностного слоя. Закаленный слой обладает модифицированными механическими и электро-химическими свойствами, что может быть связано как с изменением структуры кристаллической решетки, размера зерен, так и с блокированием перераспределения (сегрегации) примесных компонентов. Следует отметить, что данное описание справедливо для импульсной обработки с периодом обработки на несколько порядков большим периода одиночного лазерного импульса. Распределение температуры, ее градиентов и скоростей охлаждения было уже рассмотрено выше в разд. 3.2.4.

Выполнение работы:

1. Запустите пакет Comsol MultiPhysics. Загрузите с диска модель “ЛР 3 – Анализ тепловых полей при воздействии одиночного импульса.mph”.
2. Откройте вкладку “Константы” (“Constants”), рис. 3.9. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.
3. Обратите внимание на параметры лазерной обработки, задаваемые в модели. Проанализируйте значения таких параметров лазерного излучения, как продолжительность импульса, частота генерации импульсов, максимальная плотность мощности лазерного излучения. Как отличаются значения плотности мощности при импульсной и непрерывной способах обработки?
4. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Схематически зарисуйте динамику изменения изотерм с течением времени в расчетной области.

5. Сравните время, требуемое для оплавления и последующей кристаллизации поверхности, с периодом генерации импульсов. Будет ли происходить полная кристаллизация до начала следующего импульса?
6. Поменяйте значение мощности лазерного луча в 5 раз. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра? Оцените это значение.
7. Какое время требуется для кристаллизации зоны оплавления? Повторите сравнение этого времени с периодом генерации импульсов. Как изменится характер тепловой обработки в этом случае? Дайте развернутый ответ.

Вопросы для самоподготовки:

1. Что такое импульсный режим лазерной обработки?
2. Какова форма зоны оплавления при импульсной обработке?
3. Какие характерные пространственные и временные масштабы могут быть введены для импульсной обработки?

№4. Оптимизация нанесения функциональных покрытий методом напекания порошковых материалов

Цель работы: Проанализировать процесс спекания слоя металлического порошка при лазерной обработке

Описание: Теплоперенос в пористых средах с одновременным протеканием фазовых переход относится к сложным задачам в силу одновременного протекания нескольких физических процессов. Помимо выделения/поглощения тепла на фазовых границах, реализующихся при фазовых превращениях, пористая структура обладает сложной внутренней структурой, что значительно изменяет механизмы переноса энергии и вещества.

Кроме этого, подплавление поверхности отдельных частиц порошка меняет саму структуру межфазных поверхностей, удельную плотность и другие теплофизические параметры среды. В результате происходит сложный многостадийный процесс, характеризующийся наличием множества взаимосвязанных параметров. Математическое описание такой системы невозможно, поэтому требуется рассматривать некоторые параметры как эффективные величины, усредненные на мезоскопическом, т.е. промежуточном между макроскопическим и микроскопическим, масштабе. С этой целью в модель вводятся два параметра пористости: ε_V и ε_σ , характеризующие пористость в объеме и в плоском сечении образца обр. Под пористость понимается относительная доля газовой фазы г.ф. по отношению ко всему объему. Тогда выражения для ε_V и ε_σ определяются уравнениями:

$$\varepsilon_V = V_{\text{г.ф.}}/V_{\text{обр}}, \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_\sigma = S_{\text{г.ф.}}/S_{\text{обр}}, \quad (3.15)$$

где V и S — объем и площадь плоского сечения соответственно. Варьируя величину пористости и оцениваемую на ее основе характерную глубину поглощения теплового потока в скин-слое, определяемого законом, близким по форме к закону Бугера для оптически однородных сред, можно исследовать тепловые поля и зону оплавления в пористом слое металлического порошка, нанесенного на сплошную подложку.

Выполнение работы:

1. Запустите пакет Comsol MultiPhysics. Загрузите с диска модель “ЛР 4 - Изучение напекания металлического порошка при получении покрытий методом лазерной обработки.mph”.
2. Откройте вкладку “Константы” (“Constants”), рис. 3.9. Проанализируйте названия переменных, их значения и описание физических величин, которым они соответствуют.

3. Обратите внимание на определения пористости и связанные с ними другие параметры, задаваемые в модели. Проанализируйте значения таких параметров, как пористость в объеме, пористость в сечении, коэффициент поглощения лазерного излучения, объемная доля оплавления частиц.
4. Выполните расчет, сделайте анимацию движения профиля температуры с течением времени. Схематически зарисуйте динамику изменения изотерм с течением времени в расчетной области.
5. Увеличьте значение пористости в 1.5 раза. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра? Оцените это значение.
6. Задайте исходное значение пористости. Увеличьте значение коэффициента поглощения α на 50%. Повторите расчет. Как изменилась глубина зоны оплавления в результате увеличения исследуемого параметра? Оцените это значение.

Вопросы для самоподготовки:

1. Что такое пористость материала?
2. Проанализируйте качественно изменение теплофизических параметров системы при увеличении пористости.
3. Оцените роль поверхностной энергии в процессе лазерной обработки порошковых материалов, основываясь на физической сути поверхностной энергии.

3.4. Вопросы для самоконтроля по материалу главы

1. Что представляет собой метод математического моделирования физико-химических процессов?

2. Каковы основные этапы построения модели явления в программном пакете Comsol MultiPhysics?
3. Как осуществляется в Comsol MultiPhysics выбор геометрии (1D, 2D, 3D, 1D axial или 2D axial) вычислительной области после анализа условий задачи?
4. Что такое двухфазная зона?
5. Что такое задача Стефана?
6. Каковы отличия в распределении температуры при непрерывной и импульсной обработке поверхностей образцов?
7. Проанализируйте влияние мощности излучения и скорости сканирования на глубину слоя, подвергнутого рекристаллизации при обработке сплошного образца.
8. Как меняются тепловые поля и пространственные размеры зоны оплавления при изменении пористости порошкового слоя? Проанализируйте данную зависимость, основываясь на данных, полученных в расчетах.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ (в соавторстве с Д.А. Даниловым)

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

ЭКС — элемент кристаллизационной субструктуры

ЛТО — линейная термодинамика Онзагера

РНТ — расширенная необратимая термодинамика

ДМ — диаграмма микроструктур

КГТ модель — модель Курца, Гиованола и Триведи

ЛНЗ модель — модель локально—неравновесного затвердевания

Быстрая кристаллизация¹ из расплава, образованного высокоэнергетическими потоками энергии (лазерный луч, электронный пучок), открывает новые по сравнению с традиционными металлургическими процессами возможности для получения качественно иного структурного состояния в сплавах [110]. В таких условиях возможно появление широкого спектра ячеистых, полосчатых и химически однородных микроструктур, а также замораживание выделенных новых метастабильных фаз [36, 37]. Такое существенное изменение условий кристаллического структурообразования при увеличении скорости кристаллизации не может не оказывать влияния на механические свойства слоев в зоне перекристаллизации после оплавления. Известно, что способность сплавов сохранять свои механические свойства при высоких температурах определяется как дисперсностью структуры, так и скоростью собирательной рекристаллизации. Последняя зависит от коэффициентов диффузии и капиллярности и может управляться добавлением элементов Ce, Zr, Mo, V, имеющих низкие значения перечисленных коэффициентов [56, 57]. Поэтому совместное исследование структуры и механических свойств сплавов после лазерной обработки является актуальной проблемой материаловедения, физики кристаллизации и технологии машиностроения.

В главе 3 были получены данные расчетов тепловых полей в различных зонах обрабатываемой сплошной среды или порошкового слоя. Эти данные могут быть использованы для анализа процессов кристаллического структурообразования [111, 112]. В настоящей главе представлены результаты серии экспериментов по изучению и моделированию форм аустенитного роста и механических свойств в зоне оплавления конструкционной стали с содержанием 0,5 вес. % С после лазерной перекристаллизации. Вы-

¹Далее по тексту термины *кристаллизация* и *затвердевание* принимаются равнозначными, хотя терминологически они различны. Традиционно в российской литературе термин *кристаллизация* используется в более широком контексте для описания фазового перехода из жидкого состояния в твердое без учета атомного строения конечной фазы.

бор сплава, содержащего раскислители (Mn, Si) и другие элементы (Ni, Cr, P, S), связан с отсутствием практического интереса к механическим свойствам модельных, чистых сплавов на основе Fe. Например, добавление Si в сплав Fe—C существенно улучшает его механические и антикоррозионные свойства. Существующий положительный опыт моделирования кристаллического структурообразования многокомпонентных сплавов на основе железа [46] показывает доминирующее влияние углерода на формирование структуры и позволяет использовать модели высокоскоростной кристаллизации для многокомпонентных систем в квазибинарном приближении.

Для моделирования перекристаллизации в настоящей работе используется модель локально—неравновесного затвердевания [22, 58, 62, 63], которая была успешно применена для описания высокоскоростной кристаллизации при закалке из жидкого состояния в процессе спиннингования тонких лент [59—61]. Одной из отличительных особенностей модели является учет конечной скорости диффузии примеси как на поверхности раздела фаз, так и в объёме жидкой фазы при высокоскоростном затвердевании. После описания модели в пособии проанализировано влияние скорости сканирования на характеристики микроструктуры. Применение гипотезы маргинальной устойчивости в рамках модели локально—неравновесного затвердевания (ЛНЗ модели) позволяет вычислить характерный размер элемента кристаллизационной субструктуры (ЭКС) [91, 92], который в настоящей работе анализируется в сравнении с экспериментально определёнными значениями размера ЭКС. Оценивается влияние прогнозируемого размера ЭКС на предел текучести, твердость и износостойкость конструкционной стали после лазерной перекристаллизации. Далее выполняется анализ диаграммы микроструктур как функции скорости сканирования и градиента температуры на фронте.

4.1. Локально—неравновесная модель затвердевания

Термодинамика необратимых процессов [106—108], к числу которых относятся фазовые переходы, основывается на использовании ряда термодинамических принципов и законов. В приложении к рассматриваемым в данном пособии процессам следует выделить следующие важные положения феноменологического описания необратимых процессов:

- второй закон термодинамики,
- принцип максимального производства энтропии,
- соотношение Онзагера.

Второй закон термодинамики постулирует неубывание энтропии в замкнутых системах, который характеризует поведение любых термодинамических систем при стремлении к равновесию. Кроме того, при изучении конкретных систем в биологии, химии и физике этот закон дополняется каким-либо вариационным принципом, определяющим способ перехода из неравновесного к равновесному состоянию. В качестве примера можно привести принцип максимального производства энтропии, предложенный Г. Циглером [108,109]: в любой изолированной системе всегда будет реализовываться такой процесс релаксации, при котором производная энтропии по времени достигает максимального значения. Наглядным примером является дендритная кристаллизация переохлажденного расплава, при которой появление двухфазной твердо-жидкой зоны при кристаллизации способствует наиболее быстрому снятию переохлаждения. При этом система стремится максимально выделять тепло, “генерировать энтропию что выражается в формировании разветвленного ячеисто-дендритного фронта кристаллизации. В этом, интуитивно, выражается суть принципа максимального производства Циглера. Соотношение Онзагера [115] устанавливает линейную

связь между потоками и термодинамическими движущими силами:

$$\mathbf{J}_k = \sum_{i=1}^m L_{ki} \mathbf{X}_i, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (4.1)$$

где \mathbf{J}_k и \mathbf{X}_i — обобщенные потоки и термодинамические силы, L_{kj} — тензор, коэффициенты которого называются феноменологическими или кинетическими коэффициентами Онзагера. (Следует отметить, что соотношение (4.1) выводится из принципа максимального производства энтропии или принципа Циглера.) При кристаллизации градиенты концентрации и температуры приводят к возникновению термодинамических сил. Вообще говоря, соотношение Онзагера сформулировано для систем, находящихся в слабом отклонении от равновесия, для т.н. квазиравновесных систем. Для таких систем справедливо условие мгновенного локального равновесия при существовании неравновесности в целом. Однако, если степень отклонения от равновесия, определяемая расхождением термодинамических функций с их равновесными значениями, велика, то соотношение Онзагера становится неприменимо. Эволюция системы должна быть описана или нелинейными связями “поток — сила”, или локальной релаксацией потоков к своему стационарному состоянию. Расширение линейной термодинамики Онзагера (ЛТО) на нелинейную область и на случай сильно неравновесных систем было выполнено большой группой исследователей, работы которых систематизированы в монографии Жоу, Казас-Баскеса и Лебона в виде теории расширенной необратимой термодинамики (РНТ) [114].

Теория РНТ расширяет набор $\{\mathbf{X}_i\}$ “медленных” независимых переменных ЛТО дополнительным набором “быстрых” переменных $\{\mathbf{J}_i\}$, которыми являются термодинамические потоки (массы, тепла, электрического тока, вязкий тензор давления и т.д.) [113]. Как видно из сравнения с ЛТО, принцип линейной зависимости сил и потоков расширяется. Термодинамический поток может линейно зависеть от термодинамической силы, которая складывается из градиента термодинамического потенциала и от скорости

релаксации потока во времени. В этом случае величина потока зависит не только от мгновенных значений термодинамических сил, но определяется локальной релаксацией системы к стационарному состоянию. Приведенное описание имеет очень простое физическое объяснение: процессы переноса обладают некоторой латентностью, эффектом релаксации при быстром изменении состояния системы. На атомном уровне это связано с конечным временем релаксации микроскопических объемов к состоянию локального равновесия. Данные релаксационные явления оказывают незначительное влияние в квазиравновесных процессах, когда характерное время изменения состояния системы гораздо больше времени релаксации. В высокоскоростных необратимых процессах указанные времена могут иметь один порядок величины, поэтому необходим учет эффектов локальной релаксации для адекватного теоретического описания динамики изменения состояний системы. Более подробное обоснование и описание РНТ дано в монографии [114].

В применении к процессам тепло— и массопереноса наиболее простым формализмом введения релаксации является использование модифицированных уравнений Фика и Фурье [116]:

$$\tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \mathbf{J} = -D \nabla C, \quad (4.2)$$

$$\tau_T \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} = -a \nabla T, \quad (4.3)$$

где \mathbf{J} и \mathbf{q} — диффузионные потоки вещества и тепла, D и a — коэффициенты диффузии и теплопроводности, τ_D и τ_T — времена диффузионной и тепловой релаксации микроскопических объемов термодинамической системы. Два последних параметра определяются соотношениями $\tau_D = D/V_D^2$ и $\tau_T = a/V_T^2$, где V_D и V_T являются максимальными скоростями диффузии вещества и тепла в физической среде. Произведем вначале оценку времени релаксации теплового потока. При низких температурах или в полупровод-

никах величина V_T может быть адекватно оценена по частоте фононных колебаний атомов, что дает такой же порядок величины, как и скорость звука. Тогда, выбирая характерные значения как $V_T = 1000$ м/с и $a = 10^{-6}$ м²/с, время τ_T составляет 10^{-12} с. При высоких температурах проводимость и интенсивность теплопередачи будут определяться дополнительно электронным переносом, что увеличит значение V_T на 2–3 порядка. Поэтому в силу малости времени τ_T релаксационный эффект будет различим только в процессах сверхскоростного движения фронта температуры, например, в процессах горения при взрывах. В этом случае фронт распространения ударной волны может двигаться со скоростью порядка скорости распространения тепла. Далее, в случае переноса вещества диффузией величина времени релаксации есть $\tau_D = 10^{-11}$ с при характерных значениях $V_D = 10$ м/с и $D = 10^{-9}$ м²/с. Примером физических процессов, где будет существенен эффект релаксации диффузионного потока, являются закалка металлических расплавов из жидкого состояния. В этом случае фронт перехода из жидкой фазы в закаленную твердую (аморфную или кристаллическую) фазу может распространяться со скоростью порядка диффузионной скорости.

Рассмотрим влияние эффекта диффузионной релаксации на процессы высокоскоростной кристаллизации, реализующиеся при импульсной обработке поверхностей лазерным лучом, когда скорости нагрева или охлаждения достигают значений 10^7 К/с, как было установлено в главе 3. Из многочисленных экспериментальных данных известно, что при движении фронта затвердевания перед границей раздела жидкой и твердой фаз формируется область с повышенным (в случае $k < 1$) или пониженным (в случае $k > 1$) содержанием примесных компонентов в сравнении с номинальным химическим составом расплава, где $k = C_S/C_L$ — коэффициент распределения примеси, C_S и C_L — концентрация примеси на границе раздела в твердой и жидкой фазах соответственно, рис. 4.1. Если модель не учитывает эффект

релаксации диффузионного потока, то автомодельное решение уравнения диффузии предсказывает распределение концентрации C_e , характеризующееся экспоненциальным убыванием концентрации перед фронтом. При введении в модель релаксационного слагаемого характерная ширина профиля C_{ne} становится меньше, а концентрация на фронте в области жидкой фазы уменьшается, рис. 4.1(а). При этом происходит изменение механизмов переноса в области диффузной границы между фазами, что приводит к повышению коэффициента распределения k в сравнении с равновесной кристаллизацией, 4.1(б). При движении фронта кристаллизации со скоростями $V \geq V_D$, равными или большими скорости диффузии V_D , коэффициент распределения тождественно равен 1, что характеризует переход от химически разделительного к химически безразделительному затвердеванию. В этом случае сегрегация примеси на границе отсутствует. Увеличение коэффициента распределения k по мере роста скорости V в литературе носит название эффекта захвата примеси (*solute trapping effect*).

Резкий переход к бездиффузионному затвердеванию при $V = V_D$, теоретически обоснованный в [104, 118], может быть подтвержден методами численного моделирования. Рисунок 4.2 показывает распределение температуры и концентрации вокруг вершины дендрита как функцию начального переохлаждения ΔT . При $\Delta T = 100$ К пограничный слой около межфазной границы обогащен примесным элементом и имеет большую характерную ширину, рис. 4.2(а). Градиент температуры вблизи границы незначителен, рис. 4.2(г), и скорость роста много меньше, чем скорость диффузии V_D : $V/V_D = 0.026$. Это демонстрирует диффузионно-лимитируемый режим роста, когда кристаллический рост определяется диффузией примесного компонента в объем расплава. При $\Delta T = 340$ К, рис. 4.2(б), характерная ширина примесного слоя уменьшается, и примесь локализована вблизи границы. Соответственно, с ростом переохлаждения концентрация в твердой фазе

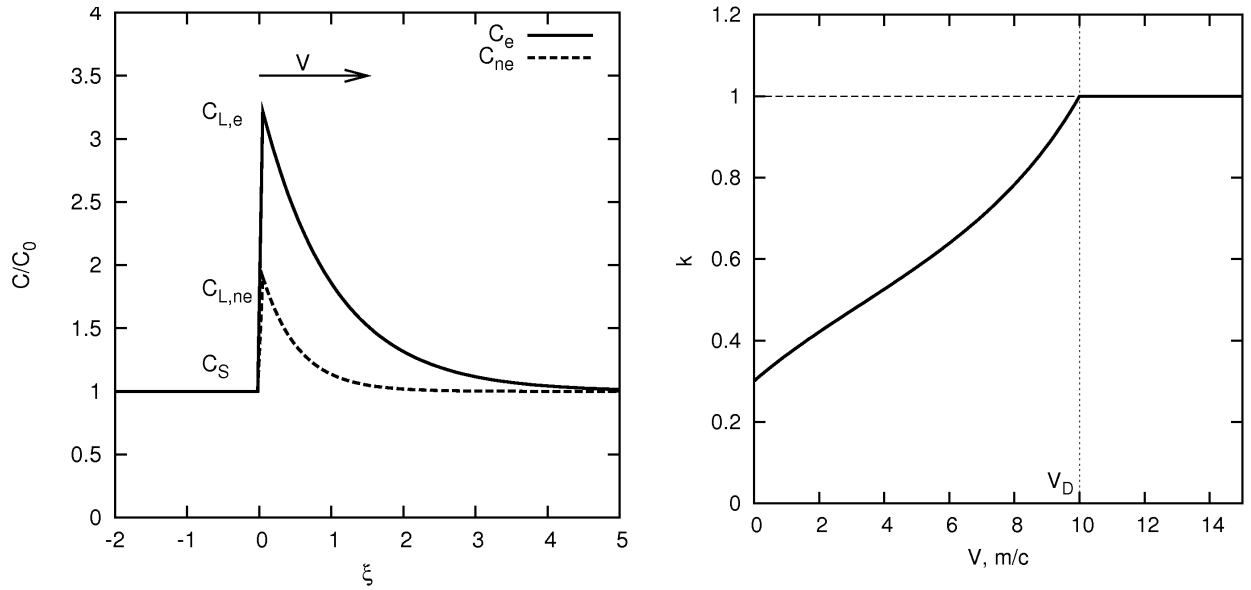


Рис. 4.1. (а) Профили C_e и C_{ne} концентрации перед движущимся с постоянной скоростью фронтом кристаллизации в равновесной и локально-неравновесной моделях затвердевания как функции безразмерной координаты $\xi = xV/D$ при $V = 0.5 V_D$. (б) Коэффициент распределения $k = C_S/C_L$ примесного компонента на границе раздела твердой и жидкой фаз как функция скорости кристаллизации V .

повышается и стремится к исходной концентрации расплава благодаря эффекту захвата примеси. Температурный градиент возрастает, рис. 4.2(д), что характеризует смешанный диффузионно-лимитируемый и термически-контролируемый режим роста. В этом случае влияние на отбор скорости и радиуса вершины дендрита оказывают процессы диффузии как примеси, так и выделяемой теплоты фазового перехода. Скорость роста имеет один порядок величины со скоростью диффузии: $V/V_D = 0.388$. Последний результат при $\Delta T = 440$ К, рис. 4.2(в,е), представляет химически безразделительное затвердевание. Безразмерная скорость вершины дендрита $V/V_D = 1.19$ (т.е. $V > V_D$), поэтому коэффициент распределения на границе $k \equiv 1$. Химический состав в твердой фазе точно равен исходному составу расплава. Подобный механизм соответствует эффекту полного захвата примеси, что является одним из основных критериев перехода к бездиффузионному затвердеванию (см. [58] и ссылки в них).

Одним из основных параметров, фиксируемых экспериментально, является скорость V_S кристаллизации, поэтому важно проанализировать связь между скоростью V_S и локальным распределением температуры и химических компонентов вблизи фронта затвердевания. Скорость V_S кристаллизации определяется величиной переохлаждения ΔT_f , являющейся разницей между температурой на фронте и температурой кинетического ликвидуса. В приближении квазибинарного сплава, когда учитывается влияние только примесного компонента, температура T_f на фронте кристаллизации описывается кинетическим уравнением [45]:

$$T_f = T_m + m_e C_0 - \Delta T_R - \Delta T_K - \Delta T_{DF} - \Delta T_N \quad (4.4)$$

где T_m — температура затвердевания основного компонента системы, m_e — тангенс угла наклона линии ликвидус на равновесной диаграмме фазового состояния бинарной системы, C_0 — исходная концентрация, а ΔT_R , ΔT_K , ΔT_{DF} , ΔT_N вклады различных составляющих в величину температуры на

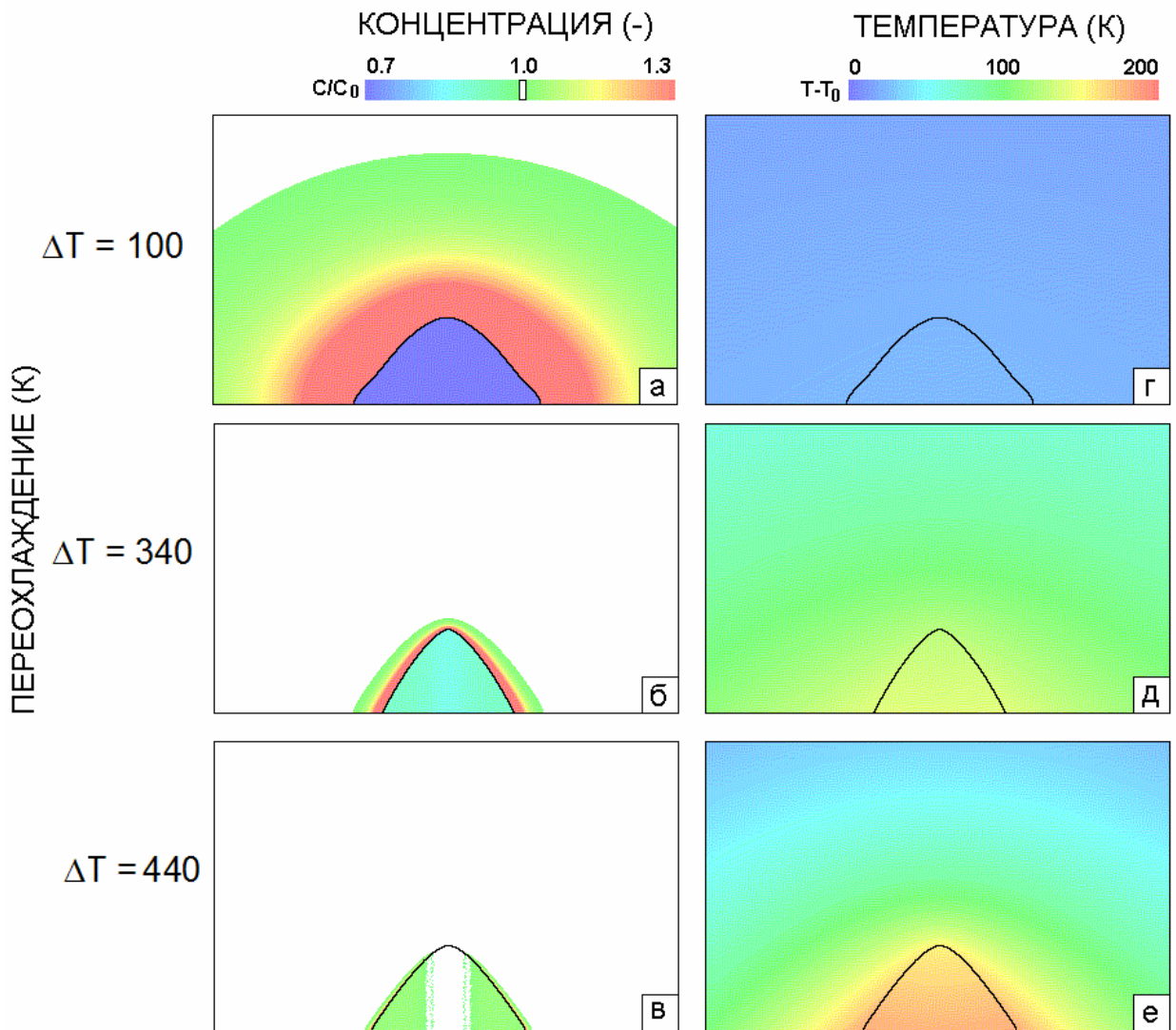


Рис. 4.2. Форма вершины дендрита как функция переохлаждения ΔT . Распределение концентрации дано на рисунках (а)–(в), где интервал концентраций $|C/C_0 - 1| < 0.01$ (вблизи номинального состава) выделен белым цветом. Распределение температуры показано на рисунках (г)–(е).

фронте кристаллизации, рис. 4.3. Смещение на поверхности металлического кристалла от равновесной температуры начала кристаллизации $T_m + m_e C_0$ (равновесной температуры ликвидуса) есть сумма следующих вкладов:

$$\Delta T_R = 2 \frac{\Gamma}{R_f} \quad (4.5)$$

— переохлаждение, вызванное эффектом Гиббса—Томсона [68], Γ — постоянная капиллярности, R_f — радиус кривизны поверхности раздела фаз;

$$\Delta T_K = \frac{V_S}{\mu} \quad (4.6)$$

— кинетическое переохлаждение [40, 45], μ — кинетический коэффициент роста;

$$\Delta T_{DF} = m_e (C_0 - C_f) \quad (4.7)$$

— диффузионное переохлаждение [40, 45], C_f — концентрация примесного компонента на фронте;

$$\Delta T_N = (m_v - m_e) C_f \quad (4.8)$$

— переохлаждение, вызванное изменением наклона линии ликвидус [40, 45]. Выражение (4.4) описывает кинетический ликвидус на неравновесной диаграмме фазового состояния при затвердевании бинарной системы и представляет собой связь между температурой, химическим составом и скоростью фазового превращения на фронте [21, 69–71].

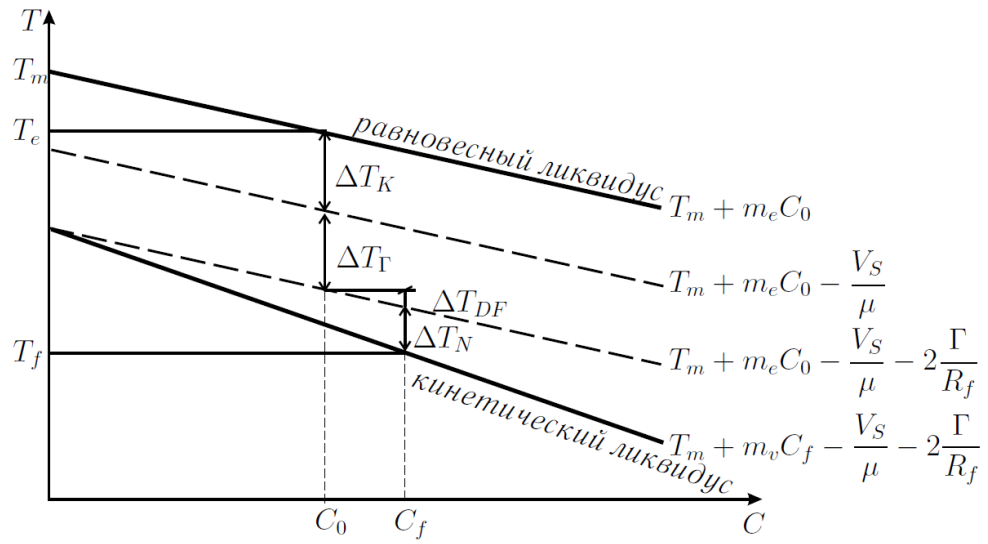


Рис. 4.3. Определение различных вкладов в величину температуры на фронте кристаллизации [40, 45].

4.2. Влияние скорости лазерной обработки на кристаллическую микроструктуру

Как установлено за последние два десятилетия, на структуру, образующуюся при высокоскоростной кристаллизации, определяющее влияние оказывает скорость движения поверхности раздела фаз и температурный градиент на фронте [45, 64–66]. Поскольку при лазерной перекристаллизации формируется высокий температурный градиент, то зарождение центров кристаллизации происходит не в объеме жидкой ванны, а на поверхности раздела жидкой и твердой фазы. Поэтому все морфологические переходы при кристаллизации системы происходят на поверхности раздела, что позволяет рассматривать и моделировать процессы тепломассопереноса только в локальной области вблизи фронта кристаллизации.

Как показал анализ, наиболее существенное влияние на морфологию образующихся структур в процессах быстрой кристаллизации оказывает скорость V_S движения фронта кристаллизации. Температурный градиент на фронте при лазерной перекристаллизации оказывает заметное влияние на формирование микроструктуры [24] только после достижения некоторого критического значения (для сплава Fe – 0,5 вес. %C около 10^5 К/м). Отметим, что для процессов лазерной перекристаллизации характерна величина градиента температуры $G = 10^6 \dots 10^8$ К/м при скорости кристаллизации до 4 м/с [24].

Рассмотрим форму оплавленной ванны при лазерной обработке. В процессе лазерной обработки сканированием со скоростью V_b , плотностью мощности E , при отсутствии влияния границ образца на распределение температурных полей, форма ванны достигает квазиравновесного состояния, схематично показанного на рис. 4.4 [25]. Стрелками показаны направления движений луча лазера, фронта плавления и фронта кристаллизации. Локальная скорость V_S кристаллизации определяется измерением угла ори-

ентации микроструктуры в продольном сечении относительно вектора скорости движения луча лазера и вычисляется из выражения [25]

$$V_S = V_b \cos \theta, \quad (4.9)$$

где θ — угол между направлениями роста структуры и скорости V_b сканирования. Согласно рис. 4.4 скорость V_S движения фронта кристаллизации по оси oz резко возрастает от нуля на дне зоны оплавления, затем плавно увеличивается и переходит в состояние, когда $V_S \approx \text{const}$. Значения градиентов G температуры на фронте кристаллизации в жидкую и твердую фазы приблизительно равны и уменьшаются с увеличением координаты z . Величина полного переохлаждения ΔT на фронте кристаллизации увеличивается по оси z .

В зависимости от энергетических характеристик лазерной обработки, размеров образца и теплофизических свойств сплава устанавливается величина скорости охлаждения в заданном объеме. Увеличение скорости \dot{T} охлаждения повышает величину переохлаждения ΔT на фронте кристаллизации. Большое переохлаждение на фронте совместно с высокими значениями градиентов, характерных для лазерной обработки, приводит к отклонению кристаллизующейся системы от локального равновесия. Локальное равновесие характеризуется равенством химических потенциалов жидкой и твердой фаз, при этом концентрация и температура вблизи поверхности раздела фаз определяются равновесной фазовой диаграммой. С увеличением скорости кристаллизации, т.е. с увеличением переохлаждения, локальное равновесие нарушается на фронте, при этом химические потенциалы на поверхности раздела неравны, что влечет за собой отклонение тангенса m_v угла наклона линии ликвидус и коэффициента k_v распределения примеси от равновесных значений m_e и k_e . В результате образуются неравновесные микроструктуры. При лазерной перекристаллизации возможен рост поверхности раздела в виде плоского фронта (*plane*

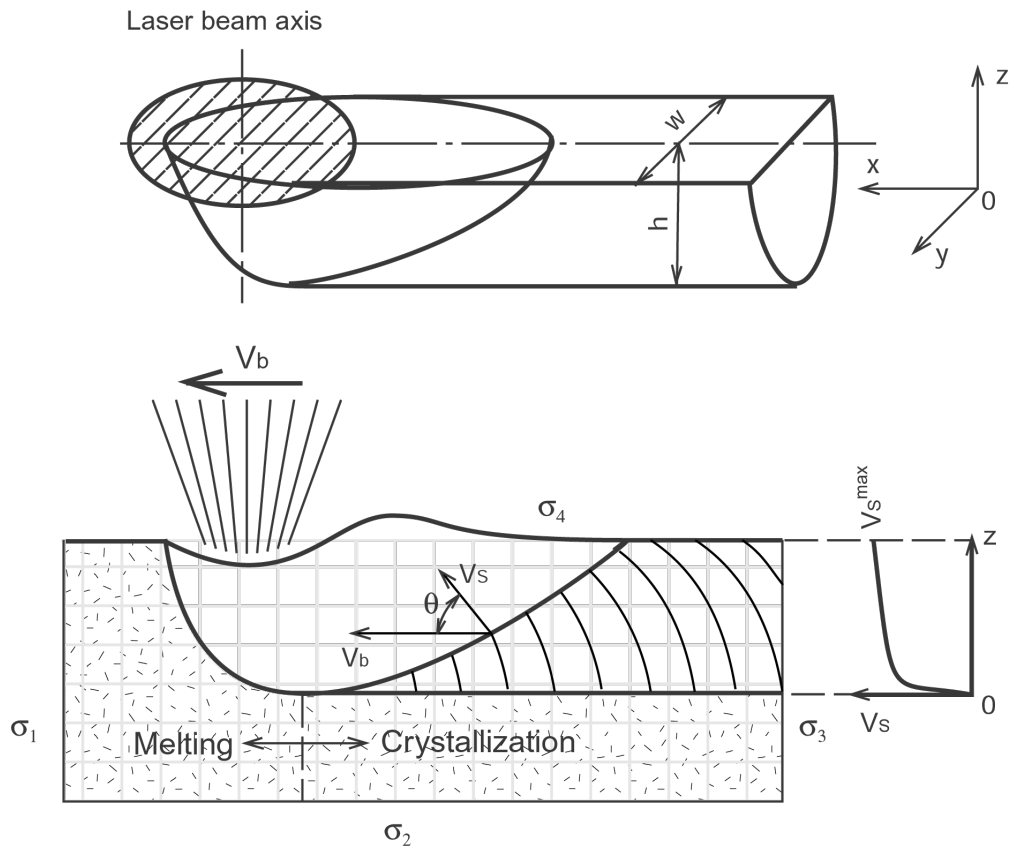


Рис. 4.4. Схематическое представление формы оплавленной ванны при лазерном нагреве. В центральной плоскости xz переплавленной трассы скорость V_S затвердевания определяется скоростью V_b движения луча лазера и углом θ ; w — ширина ванны, h — толщина ванны, T_f — температура на фронте, G — градиент температуры на фронте затвердевания.

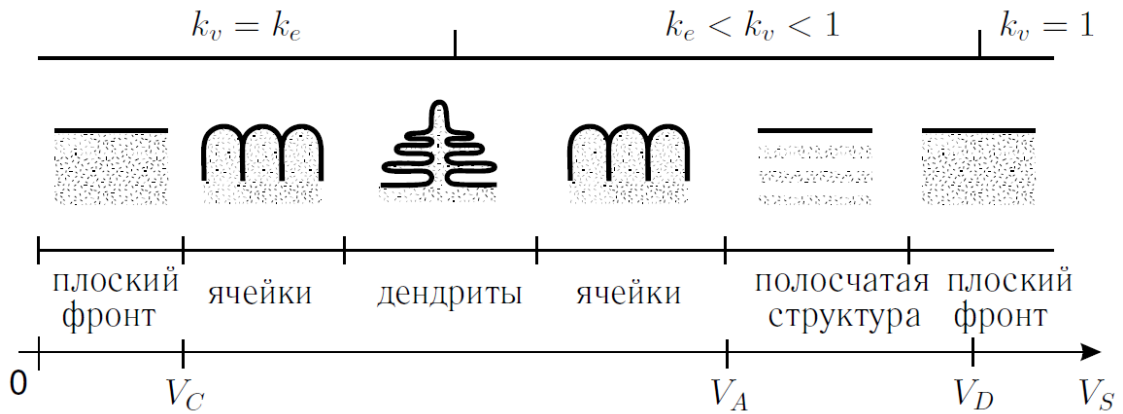


Рис. 4.5. Типы структур, формируемые при затвердевании сплавов в зависимости от скорости V_S кристаллизации [45, 67]. Данная последовательность структур наблюдается или при изотермической кристаллизации, или при кристаллизации в положительном градиенте температуры.

front), ячеек (*cells*), дендритов (*dendrites*) и полосчатой структуры (*banded structure*) [24, 45, 67]. Все перечисленные морфологии могут возникать как при однофазном, так и при многофазном затвердевании (эвтектика, интерметаллиды, фазы, образующиеся при монотектической реакции, перитектической реакции и т. д.). В дальнейшем будет рассматриваться только однофазное затвердевание применительно к процессам лазерной обработки бинарных сплавов на основе железа с примесным компонентом — углеродом. На рис. 4.5 схематично показаны типы микроструктур в зависимости от скорости V_S кристаллизации. В случае бинарного сплава, имеющего отрицательный наклон линии ликвидус, наблюдается формирование описанных выше микроструктур при увеличении скорости кристаллизации в следующей последовательности [24]:

- Рост плоского фронта вплоть до достижения критической скорости, определяемой концентрационным переохлаждением $V_C = G_L D_L / \Delta T_0$, где D_L — коэффициент диффузии в жидкой фазе, ΔT_0 — равновесный интервал температуры между ликвидусом

и солидусом для сплава состава C_0 , $\Delta T_0 = \frac{1 - k_e}{k_e} C_0 m_e$, где k_e — равновесный коэффициент распределения примеси, m_e — равновесный наклон линии ликвидуса.

- Рост ячеек в левой части рис. 4.5.
- Последовательный рост дендритов (для случая положительного градиента температуры).
- Рост ячеек до достижения предела абсолютной устойчивости $V_A = \Delta T_0^v D_L / k_v \Gamma$, где k_v — неравновесный коэффициент распределения примеси, Γ — коэффициент Гиббса–Томсона, ΔT_0^v — интервал температур между солидусом и ликвидусом на неравновесной фазовой диаграмме (см., например, [45]).
- Выше скорости абсолютной устойчивости морфологически стабильной структурой является плоский фронт, однако в некоторых случаях возможно нарушение морфологической стабильности плоского фронта, возникающее вследствие его динамической неустойчивости. В этом случае формируется полосчатая микроструктура, которая представляет собой чередование светлых полос (плоский фронт) и темных полос (ячеистая/дендритная структура). Переход от плоского фронта к ячеистой/дендритной структуре и обратно сопровождается резким изменением скорости кристаллизации и температуры на фронте.
- Затвердевание с плоским фронтом.

Во всех описанных случаях роста поверхности раздела в твердой фазе наблюдается неравномерность концентрации примеси вследствие ее перераспределения на фронте кристаллизации, характеризуемого коэффициентом k_v неравновесного распределения. Рис. 4.5 показывает также зависи-

мость k_v от скорости V_S . С уменьшением переохлаждения скорость кристаллизации падает и $k_v \rightarrow k_e$, и наоборот, с увеличением переохлаждения на фронте возрастает скорость кристаллизации, при этом $k_v \rightarrow 1$. При достижении скорости кристаллизации, близкой к скорости V_A , когда происходит переход от ячеистой структуры к плоскому фронту, начинает проявляться эффект захвата примеси, характеризуемый значением $k_v \approx 1$ [45]. Необходимо отметить, что предел $k_v = 1$ достигается только при скоростях выше скорости диффузионной релаксации ($V_S \geq V_D$) [58].

На рис. 4.6 представлена диаграмма микроструктуры (ДМ, *Microstructure Selection Map* — MSM) [24] в G — V_S координатах. Диаграмму микроструктуры для заданного сплава можно построить экспериментально, определив критические скорости перехода от одного типа микроструктуры к другому. Из рисунка видно, что с увеличением температурного градиента область роста дендритов уменьшается за счет увеличения области ячеистого роста, и с дальнейшим увеличением G превалирует кристаллизация с плоским фронтом. Для бинарного сплава Fe—0,5 вес. % С переход к морфологически устойчивому плоскому фронту происходит при $G > 0,5 \cdot 10^{10}$ К/м. В процессах лазерной обработки градиент и скорость кристаллизации взаимосвязаны (пунктирная кривая на графике), поэтому морфология субструктур и характерный размер ЭКС часто рассматриваются как функция от V_S [24, 25, 27, 32, 33, 46, 66].

4.3. Анализ морфологической устойчивости фронта кристаллизации

Оценить характерный размер кристаллов (ЭКС), формирующихся при лазерной перекристаллизации, можно, используя гипотезу маргинальной устойчивости [74], согласно которой отбираемый размер элемента структуры равен наименьшей длине волны малого возмущения плоской границы раздела фаз, соответствующей маргинальной (пограничной) длине

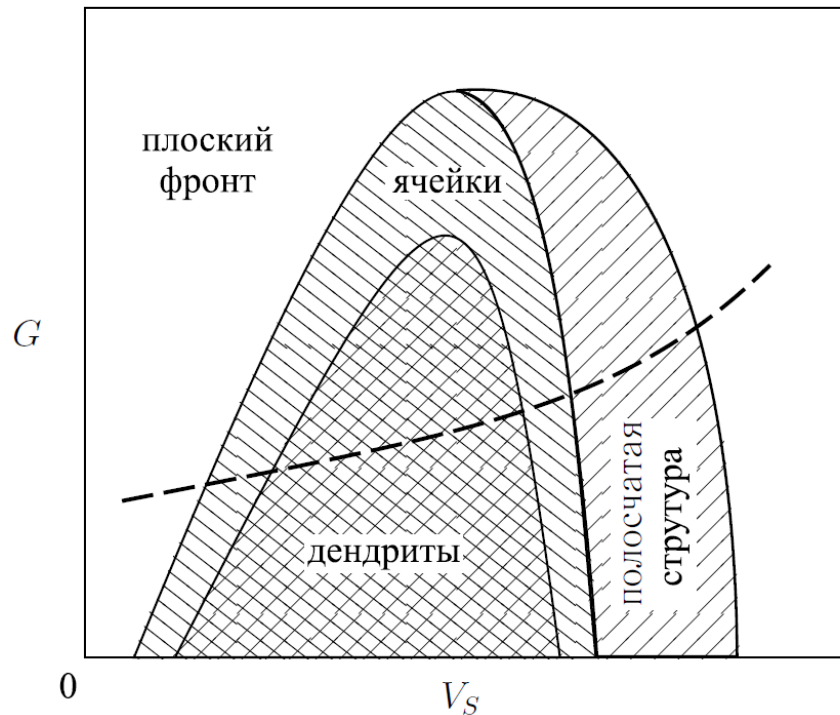


Рис. 4.6. Экспериментально фиксируемое влияние градиента G температуры и скорости V_S кристаллизации на морфологический спектр структур [24, 25, 27, 32, 33, 46, 66]. Пунктирная кривая на графике представляет некоторый диапазон лазерной обработки.

волны между морфологически устойчивым и неустойчивым состоянием границы раздела. Анализ морфологической устойчивости Маллинза—Секерки базируется на решении проблемы тепломассопереноса при кристаллизации [45, 65, 72, 73], которое было обобщено для высокоскоростного роста кристаллов при значительных отклонениях от локального равновесия в диффузионном поле переноса примеси [62, 63].

Уравнения модели. В теории морфологической устойчивости плоского фронта в условиях высокоскоростной кристаллизации [65] рассматривается эволюция малого возмущения плоской границы раздела фаз,двигающийся с постоянной скоростью V_S вдоль оси z , согласно рис. 4.7. Поверхность раздела фаз с наложенным возмущением длиной волны λ описывается уравне-

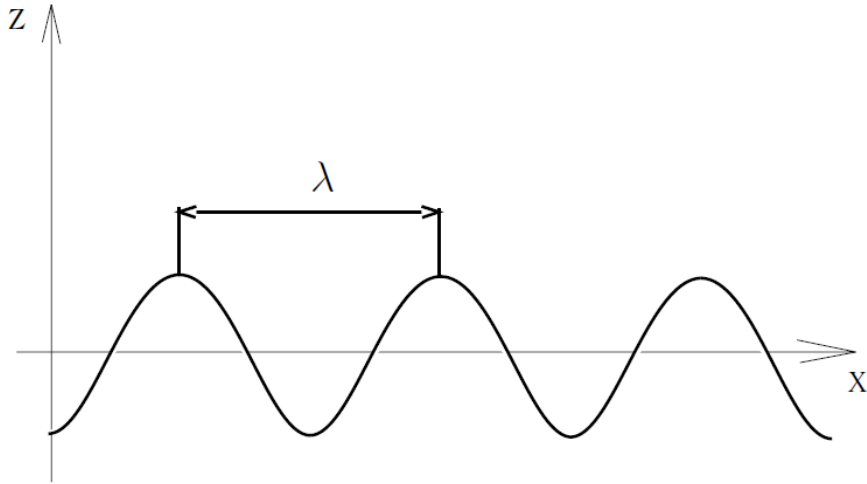


Рис. 4.7. Возмущенная поверхность раздела фаз длиной волны λ .

нием [65]

$$z = \delta(t) \sin \omega x, \quad (4.10)$$

где δ — амплитуда, ω — частота возмущения ($\omega = 2\pi/\lambda$). Согласно уравнению (4.10), при $\frac{d\delta}{dt} > 0$ возмущение плоского фронта нарастает, что приводит к морфологической неустойчивости плоского фронта кристаллизации. В случае $\frac{d\delta}{dt} < 0$ происходит затухание возмущений на фронте кристаллизации. Из решений [65] уравнений тепломассопереноса в квазиравновесных условиях маргинальной устойчивости возмущенного плоского фронта кристаллизации при $\frac{d\delta}{dt} = 0$ соответствует условие баланса стабилизирующих и дестабилизирующих факторов на границе раздела:

$$-\Gamma\omega^2 - \bar{K}_L G_L \xi_L - \bar{K}_S G_S \xi_S + m_v G_C \xi_C = 0, \quad (4.11)$$

где G_C , G_L , G_S — градиент концентрации, температурные градиенты на фронте со стороны жидкой и твердой фазы соответственно, $\bar{K}_L = K_L/(K_S + K_L)$, $\bar{K}_S = K_S/(K_S + K_L)$, K_L, K_S — коэффициенты теплопроводности в

жидкой и твердой фазе соответственно, ξ_L, ξ_S, ξ_C — функции устойчивости

$$\xi_L = (\omega_L - (V_S/a_L))/(\bar{K}_S\omega_S + \bar{K}_L\omega_L) \quad (4.12)$$

$$\xi_S = (\omega_S + (V_S/a_S))/(\bar{K}_S\omega_S + \bar{K}_L\omega_L) \quad (4.13)$$

$$\xi_C = (\omega_C - (V_S/D_L))/(\omega_C - (V_S/D)(1 - k_v)), \quad (4.14)$$

где a_L, a_S — коэффициенты температуропроводности в жидкой и твердой фазе соответственно,

$$\omega_C = (V_S/2D_L) + ((V_S/2D_L)^2 + \omega^2)^{1/2} \quad (4.15)$$

$$\omega_L = (V_S/2a_L) + ((V_S/2a_L)^2 + \omega^2)^{1/2} \quad (4.16)$$

$$\omega_S = - (V_S/2a_S) + ((V_S/2a_S)^2 + \omega^2)^{1/2}. \quad (4.17)$$

Уравнение 4.11 связывает скорость V_S с длиной волны $\lambda = 2\pi/\omega$ возмущенного фронта и представляет баланс стабилизирующих и дестабилизирующих сил, вызывающих нарастание или затухание возмущений плоского фронта. В условиях лазерной перекристаллизации поверхности сплава Fe—C единственной дестабилизирующей силой в уравнении 4.11 является слагаемое $m_v G_C \xi_C$ (тангенс угла m_v наклона линии кинетического ликвидуса, градиент G_C концентрации отрицательны, градиенты G_L, G_S температуры положительные). Таким образом, причиной возмущения первоначально плоского фронта является концентрационная неоднородность, возникшая вследствие перераспределения примеси на фронте кристаллизации. При достижении фронтом диффузионной скорости, $V_S \geq V_D$, отсутствуют силы, вызывающие морфологическую неустойчивость плоской поверхности раздела фаз из-за перехода к химически однородному (безразделительному) затвердеванию, при котором концентрационный градиент равен нулю.

Согласно гипотезе маргинальной устойчивости, радиус R_d вершины дендрита связан с длиной волны λ маргинальной устойчивости фронта, определенной по критерию морфологической стабильности, т. е.

$$R_d = \lambda = 2\pi/\omega. \quad (4.18)$$

Далее предполагается, что поперечная толщина d дендрита/ячейки коррелирует с радиусом R ее вершины, что подтверждается рядом экспериментальных работ (см., например, [46, 66]), т. е.

$$d \approx R_d = \lambda \quad (4.19)$$

Таким образом, подставляя выражение (4.19) в формулу (4.13) для вычисления функций устойчивости, входящих в уравнение (4.11) критерия морфологической стабильности, можно получить соотношение между значениями поперечной толщины d дендрита/ячейки и скоростью V_S кристаллизации, справедливом как при высокоскоростном затвердевании, так и при затвердевании с малыми скоростями [65].

Дальнейшее развитие анализа связано с учетом влияния на морфологическую устойчивость фронта кристаллизации эффекта релаксации диффузионного потока примеси [62], играющего для сплава Fe—C существенную роль при скоростях затвердевания выше 1 м/с. Учет эффекта диффузионной релаксации приводит к гиперболическому уравнению массопереноса примеси в расплаве

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \tau_D \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = D_L \nabla^2 C, \quad (4.20)$$

где C — концентрация примеси, τ_D — время диффузионной релаксации, D — коэффициент диффузии примеси. Уравнение (4.20) учитывает диффузионную скорость $V_D = (D_L/\tau_D)^{1/2}$, которая является максимальной скоростью распространения концентрационных возмущений.

Анализ морфологической устойчивости плоской поверхности раздела фаз (4.15) в концентрационном поле, описываемом уравнением (4.20) совместно с гипотезой маргинальной устойчивости (4.19) [97], приведен в работе [62]. Для этого случая получено соотношение, позволяющее определять характерный размер d элемента кристаллизационной субструктуры

(поперечная толщина дендритов/ячеек):

$$d = \left(\frac{\Gamma/v}{m_v G_C \xi_C - \frac{1}{2} (G_L \xi_L + G_S \xi_S)} \right)^{1/2}, \quad (4.21)$$

где $v = (4\pi^2)^{-1}$ — параметр устойчивости,

$$G_C = -\frac{(1 - k_v) V_S C_0}{k_v D_L (1 - V_S^2/V_D^2)} \quad (4.22)$$

— градиент концентрации примеси [58], C_0 — концентрация примеси вдали от фронта кристаллизации (равная исходной концентрации), G_L и G_S — градиенты температуры на фронте кристаллизации со стороны расплава и твердой фазы. Функции устойчивости ξ имеют вид

$$\xi_L = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{v P_T^2}}}, \quad (4.23)$$

$$\xi_S = 1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{v P_T^2}}}, \quad (4.24)$$

$$\xi_C = 1 + \frac{2k_v}{1 - 2k_v - \sqrt{1 + \frac{1 - V_S^2/V_D^2}{v P_C^2}}}, \quad (4.25)$$

и зависят от теплового $P_T = V_S d / 2a_L$ и концентрационного $P_C = V_S d / 2D_L$ числа Пекле.

Неравновесный коэффициент распределения примеси с учетом эффекта релаксации диффузионного потока определяется соотношением [75]

$$k_v = \begin{cases} \frac{k_e(1 - V_S^2/V_D^2) + V_S/V_D}{(1 - V_S^2/V_D^2) + V_S/V_D}, & V_S < V_D, \\ 1, & V_S \geq V_D \end{cases}, \quad (4.26)$$

где k_e — равновесный коэффициент распределения примеси. Тангенс угла наклона линии ликвидус на кинетической фазовой диаграмме с учетом эф-

фекта релаксации диффузионного потока определяется соотношением [98]

$$m_v = \begin{cases} \frac{m_e}{1 - k_e} (1 - k_v + \ln(k_v/k_e) + (1 - k_v)^2 V_S/V_D), & V_S < V_D, \\ \frac{m_e \ln(1/k_e)}{1 - k_e}, & V_S \geq V_D \end{cases}, \quad (4.27)$$

где m_e — наклон линии ликвидус на равновесной диаграмме фазового состояния бинарного сплава.

Отметим, что уравнение (4.21) справедливо при скорости кристаллизации, меньшей скорости диффузии, т.е. при $V_S < V_D$. При скорости движения фронта кристаллизации, превышающей диффузионную скорость, происходит вырождение концентрационного профиля перед фронтом, и исчезает дестабилизирующая сила, связанная с градиентом концентрации примеси. Так как кристаллизация при лазерной обработке происходит в положительном градиенте температуры, то при скорости $V_S \geq V_D$ отсутствуют силы, вызывающие морфологическую неустойчивость плоской поверхности раздела фаз.

Результаты вычислений. На основе приведенной системы уравнений (4.21) — (4.27) производились вычисления характерного размера ЭКС в зависимости от скорости кристаллизации для используемого в настоящей работе сплава Fe — 0,5 вес. % С. Константы данного сплава представлены в таблице 4.1.

На рис. 4.8 приведены результаты вычислений поперечной толщины d дендритов в зависимости от скорости V_S кристаллизации для нескольких значений градиентов G температуры. Градиенты температуры со стороны жидкой и твердой фаз принимались равными ($G_L = G_S$). Теплопроводность принималась одинаковой в жидкой и твердой фазах ($K_L = K_S$). Из рис. 4.8 видно, что увеличение G приводит к смещению значения критической скорости V_C и увеличению размера элемента кристаллизационной субструктуры (ЭКС). Смещение значения скорости V_A абсолютной устой-

Таблица 4.1. Физические параметры системы Fe—C

Обозначение	Размерность	Значение	Источник
C_0	ат. %	2,29	настоящие исследования
m_e	К/ат. %	−14	[45]
T_m	К	1811	[45]
ΔH	Дж/м ³	$1,93 \cdot 10^9$	[45]
K	Вт/(К·м)	35	[45]
c_p	Дж/(К·м ³)	$5,74 \cdot 10^6$	[45]
D_L	м ² /с	$2 \cdot 10^{-8}$	[45]
μ	м/(с·К)	0,1	настоящие исследования
V_D	м/с	17	[61]

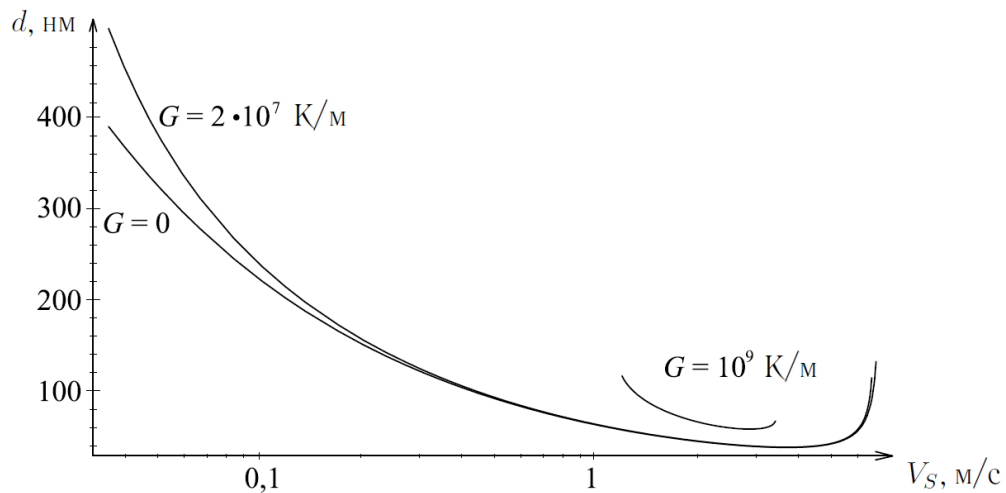


Рис. 4.8. Поперечная толщина дендритов d как функция от скорости затвердевания V_S и температурного градиента G для сплава Fe—C (константы сплава представлены в таблице 4.1).

чивости для данного сплава происходит только при температурном градиенте больше $1 \cdot 10^8$ К/м, т.к. в этом случае не выполняется условие $G \ll k_v G V_S^2 / D_L$ [45]. Увеличение температурного градиента более значения $0,5 \cdot 10^{10}$ К/м для сплава, используемого в настоящей работе, приводит к вырождению структуры и преобладанию плоского фронта затвердевания

во всем диапазоне скоростей кристаллизации (уравнение (4.21) не имеет решений).

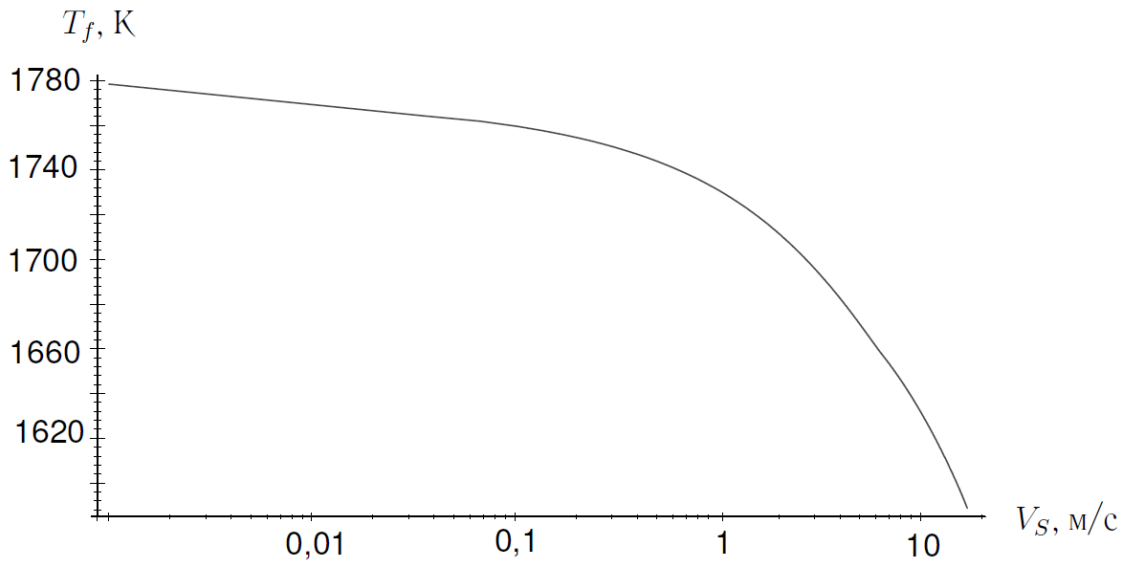


Рис. 4.9. Зависимость температуры T_f на фронте от скорости кристаллизации

Таблица 4.2. Расчет характерного размера ЭКС

V_b , м/с	V_S , м/с	G , К/м	$d_{\text{модель}}$, мкм	$d_{\text{эксп}}$, мкм
0,010	0,01	$3,0 \cdot 10^6$	0,87	1,0
0,042	0,0144	$1,2 \cdot 10^7$	0,99	0,75
0,067	0,023	$1,5 \cdot 10^7$	0,66	0,67
0,092	0,0315	$1,7 \cdot 10^7$	0,53	0,43
0,092	0,092	$1,7 \cdot 10^7$	0,23	0,16
0,142	0,06	$2,0 \cdot 10^7$	0,34	0,33
0,167	0,084	$2,0 \cdot 10^7$	0,25	0,18

На рис. 4.9 показана зависимость температуры T_f на фронте от скорости кристаллизации для сплава Fe—0,5 вес. % С, полученная на основе решения уравнений (4.21) – (4.27) совместно с уравнением (4.4). Концентрация примеси C_f на фронте в уравнении (4.4) определяется на основе

решения, полученного Иванцовым для параболического дендрита в стационарном режиме движения и обобщенного для локально—неравновесного затвердевания. В этом случае концентрация на вершине дендрита определяется из уравнения

$$C_f = \frac{C_0}{1 - (1 - k_v)Iv(P_C)}, \quad (4.28)$$

где $Iv(P_C)$ — функция Иванцова, P_C — концентрационное число Пекле, $Iv(P_C) = P_C \exp(P_C)E_1(P_C)$, где E_1 — экспоненциальный интеграл. Константы сплава, используемые в расчете, приведены в таблице 4.1; значение температурного градиента принималось $G = 2 \cdot 10^7$ К/м, характерное для случая лазерной обработки поверхности со скоростью $V_b = 0,167$ м/с. Поведение функции, представленной на рис. 4.9, определяется вкладом различных составляющих в значение температуры T_f в соответствии с уравнением (4.4). Данная функция имеет важное прикладное значение и позволяет определять величину переохлаждения на фронте для данного сплава в зависимости от скорости кристаллизации.

Используя систему уравнений (4.21) — (4.27), был выполнен вычислительный эксперимент по сравнению экспериментально определенных значений характерного размера d ЭКС с вычисленными размерами для нескольких значений скорости V_S кристаллизации. При расчете скорость V_S движения фронта кристаллизации определялась по фотографиям в соответствии с уравнением (4.9), градиент концентрации определялся по скорости кристаллизации из уравнения (4.22), а градиент температуры $G = G_L = G_S$ определялся численным моделированием теплового поля. В таблице приведены результаты расчетов характерного размера $d_{\text{модел}}$ ЭКС в сравнении с экспериментальными $d_{\text{эксн}}$. Представленные в таблице результаты показывают хорошее соответствие данным эксперимента и подтверждают возможность использования модели локально—неравновесного затвердевания

совместно с гипотезой маргинальной устойчивости для оценки характерного размера ЭКС, возникающей в процессе лазерной перекристаллизации.

4.4. Прогнозирование характеристик кристаллической микроструктуры

Как отмечено ранее, построение диаграммы микроструктур (ДМ), показанной на рис. 4.5, является достаточно эффективным способом прогнозирования микроструктуры в процессах высокоскоростного затвердевания. В результате ДМ фактически стала широко используемой методикой проверки адекватности моделей затвердевания равновесных и метастабильных фазовых диаграмм. В настоящем разделе предлагается дальнейшее развитие описания микроструктуры при лазерной обработке в терминах ДМ. Используются экспериментальные данные и результаты теоретического описания процесса лазерной обработки поверхности образцов из конструкционной стали [91–93]. ДМ рассчитывается в координатах “температурный градиент — локальная скорость кристаллизации” для предсказания морфологии кристаллической микроструктуры в стали.

Для анализа процессов, происходящих в зоне лазерного плавления, производится компьютерное моделирование тепло- и массопереноса в масштабе, сопоставимом с межкристаллитным размером, и прогнозирование морфологии кристаллической структуры и распределения примеси (углерода) в образце. Сочетание результатов моделирования с анализом характерного размера ЭКС, выполненном в предыдущем разделе, позволяет прогнозировать кристаллическую структуру при различных режимах лазерной обработки [91–93].

Уравнения модели. Для моделирования морфологии микроструктуры при лазерной закалке была использована модель двухфазной зоны [61],

расширенная для процесса высокоскоростного затвердевания. Модель учитывает эффект локально—неравновесной релаксации в процессах диффузионного переноса примеси, который оказывает значительное влияние на механизм сегрегации примеси при больших скоростях затвердевания. Модель двухфазной зоны, использованная в настоящей работе, дается следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\Delta T + Q\frac{\partial g}{\partial t}, \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - g)C_L + gkC_L] + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (4.30)$$

$$\tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \mathbf{J} + D(1 - g)\nabla C_L = 0, \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \nabla \cdot [(1 - g)\mathbf{V}], \quad (4.32)$$

$$C_S = kC_L, \quad (4.33)$$

$$T_I = T_A + mC_L + \Gamma K - V/\mu, \quad (4.34)$$

где T — температура, t — время, a — коэффициент температуропроводности, Q — скрытая теплота кристаллизации, $0 \leq g \leq 1$ — доля твердой фазы в локальном объеме двухфазной зоны, C_L и C_S — концентрация примесного компонента в жидкой и твердой фазах соответственно, \mathbf{J} — диффузионный поток, $\tau_D = D_L/V_D^2$ — время диффузионной релаксации диффузионного потока к своему стационарному значению, D — коэффициент диффузии, \mathbf{V} — вектор скорости кристаллического роста, T_I — температура на границе раздела фаз, T_A — температура затвердевания основного компонента, K — кривизна, μ — кинетический коэффициент роста. Выражения для неравновесных коэффициента k_v распределения примеси и тангенса m_v наклона кинетической линии ликвидус в точности соответствуют выражениям, введенным уравнениями (4.26) и (4.27) соответственно.

Математическая модель и вычислительные алгоритмы описаны в [61]. Модель предназначена как для описания высокоскоростного затвердевания

со скоростями порядка скорости диффузии (1–20 м/с), так и для изучения процессов с меньшими скоростями $V < 1$ м/с.

Используя эту модель, выполнено двумерное моделирование роста кристаллической структуры в зоне лазерного оплавления, при котором величины скорости кристаллического роста и температурного градиента на межфазной границе принимались в качестве варьируемых параметров. После начального переходного периода, сопровождающегося изменением параметров структуры, происходил переход к стационарному режиму движения фронта затвердевания, характеризующемуся сохранением характеристик кристаллической структуры. Данные характеристики, к которым относятся морфология (форма роста кристаллов), межкристаллическое расстояние, распределение примесного компонента, могут быть исследованы на экспериментальных образцах.

Обобщенные результаты моделирования представлены в виде ДМ на рис. 4.10. Морфология определена как ячеистые кристаллы, дендритные кристаллы, бесструктурные кристаллы (растущие с плоским фронтом в зависимости от значений параметров V и G_L). ДМ определяет границу между ячеисто-дендритной морфологией и бесструктурной морфологией по результатам численных и аналитических расчетов. Штрих-пунктирная линия соответствует расчетам по КГТ модели [95] и отображает границу между кристаллическим ростом с возмущенным и невозмущенным фронтом. Непрерывная линия соответствует результатам расчетов согласно локально-неравновесной модели (ЛНЗ модели) [61]. По периметру диаграммы приведены результаты моделируемых структур, соответствующие различным областям параметров V и G_L . В частности, показан переход от ячеисто-дендритной структуры к плоскому фронту при увеличении скорости V , если второй параметр, температурный градиент G_L , остается постоянным.

Геометрический отбор форм роста. При малых скоростях затвердевания в расчетах наблюдался так называемый “геометрический отбор”, когда взаимодействие тепловых и концентрационных полей близко расположенных растущих дендритов приводит к замедлению роста одних кристаллов и увеличению скорости роста других. В результате происходит выклинивание структуры и отбор характерного междендритного расстояния. Такой отбор протекает на протяжении значительного интервала времени уже после завершения начального переходного режима роста. Этот отбор происходит до установившегося квазистационарного режима затвердевания, характеризующегося постоянной скоростью роста, определяемой скоростью движения лазерного луча. До настоящего времени проблема геометрического отбора недостаточно полно изучена, но эффект влияния такого отбора на характерное межкристаллическое расстояние весьма значителен.

Абсолютная устойчивость. Согласно результатам, представленным на рис. 4.10, переход от дендритно-ячеистой морфологии к плоскому фронту может происходить при увеличении величины температурного градиента для фиксированной скорости затвердевания. При величине температурного градиента выше $2 \cdot 10^9$ К/м наблюдается рост с плоским фронтом при любом значении скорости затвердевания. Это свидетельствует о достижении области абсолютной устойчивости, когда поверхность раздела фаз сохраняет устойчивость к возмущениям. Физическая причина абсолютной устойчивости состоит в достижении протяженности диффузионного слоя перед фронтом затвердевания характерной длины капиллярности фронта. Верхний предел скорости V , когда фронт затвердевания устойчив при любом значении температурного градиента G_L , соответствует скорости абсолютной устойчивости $V_A = 7,04$ м/с.

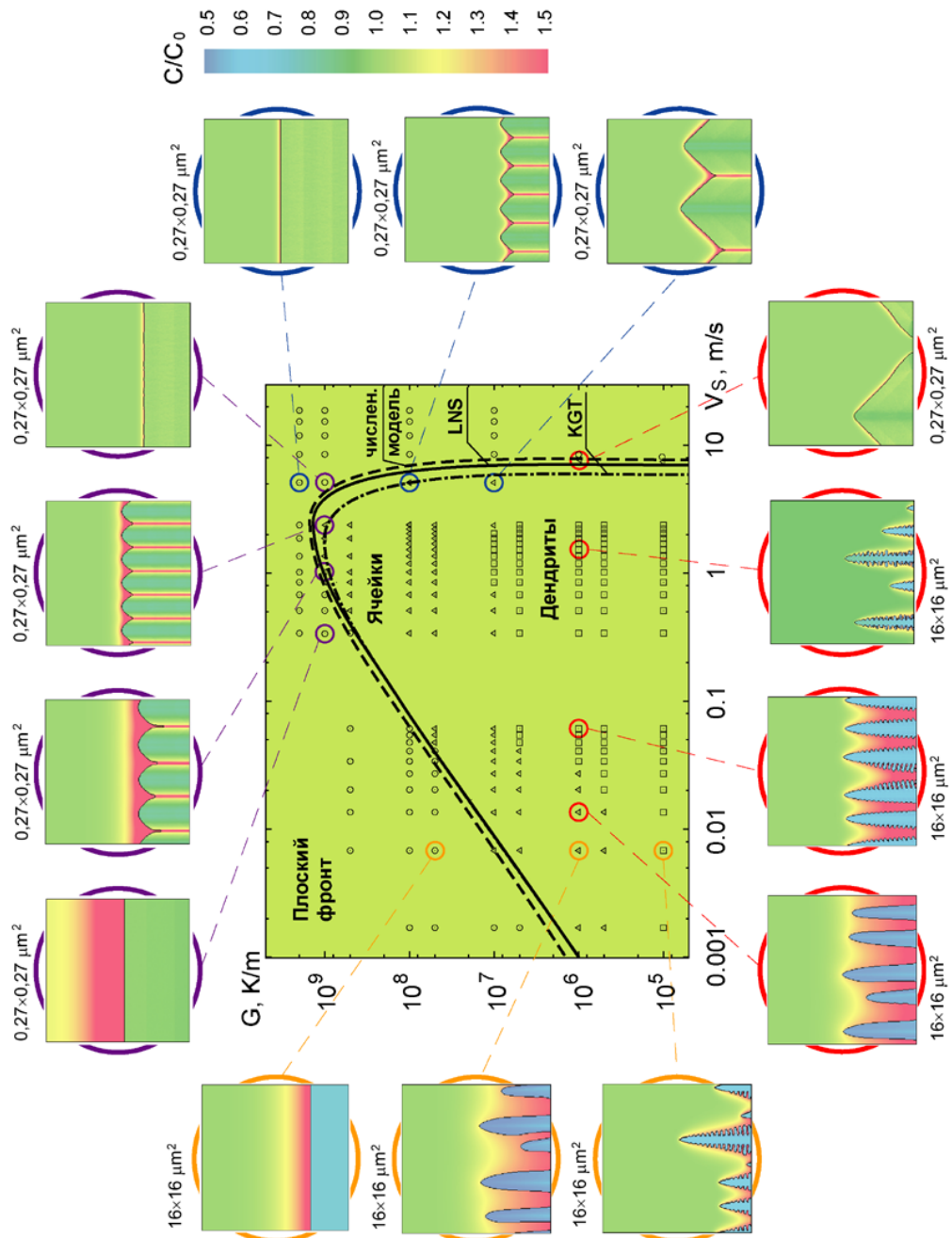


Рис. 4.10. Диаграмма микроструктур (ДМ), полученная по результатам двумерного численного моделирования затвердевания конструкционной стали. ДМ показывает зависимость морфологии кристаллической структуры от температурного градиента G_L и скорости затвердевания V . \square — дендриты, \triangle — ячейки, \circ — затвердевание с плоским фронтом. Линии — граница между областями затвердевания по типу возмущенного и невозмущенного фронтов (т.е. ячейки и плоский фронт соответственно) — получены численным моделированием (штриховая линия), с использованием аналитических локально-неравновесной модели (непрерывная линия, ЛНЗ модель) и КГТ (штрих-пунктирная линия) модели. Малые рисунки вдоль периметра ДМ демонстрируют формы роста кристаллов и распределение примесного компонента (углерода) в расчетной области при определенном значении параметров G_L и V

Факторы, влияющие на морфологическую устойчивость. Для построения ДМ использована модель (4.29)-(4.34). Численное решение этой модели позволяет оценить влияние следующих факторов:

- а) концентрационного градиента G_C ;
- б) температурного градиента G_L ;
- в) поверхностного натяжения Γ .

Затвердевание сплава в зоне лазерного оплавления осуществляется при положительном температурном градиенте, $G_L > 0$, следовательно, фактор b оказывает стабилизирующее действие на границу раздела фаз и способствует развитию морфологии типа плоского фронта. Напротив, фактор a оказывает дестабилизирующее влияние на границу раздела и способствует росту дендритов и ячеек. Фактор v оказывает стабилизирующее действие на морфологическую устойчивость плоского фронта затвердевания.

Различное соотношение этих факторов ведет к развитию возможных форм роста. При малых скоростях роста $V < 0,01$ м/с величина концентрационного градиента G_C на границе раздела незначительна. Это дает переход от ячеек к плоскому фронту при относительно низком температурном градиенте $G^* \sim 10^6 - 10^7$ К/м. В интервале средних скоростей $0,01 < V < 3$ м/с величина концентрационного градиента G_C значительно возрастает, следовательно, величина градиента структурного перехода увеличивается до значения $G^* \sim 10^9$ К/м. При скорости $V \sim 7$ м/с действие стабилизирующих эффектов становится преобладающим, и граница раздела остается устойчивой при произвольном значении G_L . Такой переход к плоскому фронту возможен с началом интенсивного захвата примеси фронтом. Как КГТ, так и ЛНЗ модель учитывают эффект захвата примеси введением неравновесного коэффициента k распределения, зависящего от скорости V . При увеличении скорости коэффициент k возрастает в сравнении с равновесным коэффициентом k_e , что в итоге приводит к уменьшению величины кон-

центрационного градиента G_C . Соответственно влияние стабилизирующих факторов увеличивается. Таким образом, эффект захвата примеси может являться основной причиной достижения критическим градиентом G^* нулевого значения при $V = V_A$.

Оценка локальной неравновесности. Сравнение решений, полученных с использованием КГТ и ЛНЗ моделей, приводит к интересным результатам. При скоростях $V < 1$ м/с оба решения совпадают, но в интервале скоростей $V > 1$ м/с решения начинают расходиться. В частности, КГТ модель дает значение скорости абсолютной устойчивости $V_A = 5,75$ м/с при значении $V_A = 7,04$ м/с, полученном в ЛНЗ модели. Указанное расхождение свидетельствует, что точное представление эффекта захвата примеси важно для корректного описания поведения системы. Одно из принципиальных различий КГТ и ЛНЗ моделей заключается в описании именно неравновесного коэффициента k распределения.

Эффект релаксации в ЛНЗ модели приводит к формированию концентрационного слоя меньшей ширины, чем предсказывает КГТ модель, и соответственно большему значению концентрационного градиента G_C . Таким образом, скорость абсолютной устойчивости, оцениваемая в ЛНЗ модели, сдвинута в область более высоких скоростей, чем это предсказывает КГТ модель (см. рис. 4.10).

4.5. Вопросы для самоконтроля по материалу главы

1. Чем определяется характерный размер микроструктуры?
2. Дайте определение эффекта релаксации диффузионного потока. Каковы физические причины релаксации? Дайте определение модифицированного закона Фика.

3. Как зависит морфология кристаллической структуры от (а) скорости движения лазерного луча, (б) установившегося градиента температуры в зоне лазерного оплавления? Опишите общие закономерности.
4. Как меняется процесс сегрегации (перераспределения) примеси при реализации высоких скоростей обработки?

Литература

1. Лазер [Электронный ресурс] / Википедия — свободная энциклопедия. — Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki/Лазер>. (дата обращения: 18.12.2010).
2. Звелто О. Принципы лазеров. М.: Мир, 1990. 560 с.
3. Encyclopedia of physical science and technology. Lasers and masers. 245 p.
4. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т. 1,2. М.: Изд-во Наука, 1974.
5. Freund H. P., Neil G. R., Free-Electron Lasers: Vacuum Electronic Generators of Coherent Radiation // Proc. IEEE, **87** (1999) 782–803.
6. Weber, M. J. Handbook of Laser Wavelengths. CRC Press, Boca Raton, FL, 1999.
7. Либенсон М.Н., Яковлев Е.Б., Шандыбина Г.Д. Взаимодействие лазерного излучения с веществом (силовая оптика) // Конспект лекций. Часть I. Поглощение лазерного излучения в веществе. Под общей редакцией В.П. Вейко - СПб: СПб ГУ ИТМО, 2008. 141 с.
8. Делоне Н.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом // Курс лекций: Учеб. руководство. М.:Наука, 1989. 280 с.
9. Вейко В.П., Петров А.А. Опорный конспект лекций по курсу “Лазерные технологии”. Введение в лазерные технологии. СПб: СПбГУ ИТМО, 2009. 143 с.

10. Лазерная техника и технология. В 7 кн. Кн. 6. Основы лазерного термоупрочнения сплавов: Учеб. пособие для вузов / А.Г. Григорьянц, А.Н. Сафонов. - М.: Высш. шк., 1988. 159с.
11. Лазерная техника и технология. В 7 кн. Кн. 3. Методы поверхностной лазерной обработки: Учеб. пособие для вузов / А.Г. Григорьянц, А.Н. Сафонов.-М.: Высш. шк., 1988. 159 с.
12. Миркин Л.И. Физические основы обработки материалов лучами лазеров. М.: Изд-во МГУ, 1975. 304 с.
13. Рыкалин Н.Н. и др. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: Справочник. М.: Машиностроение, 1985. 496 с.
14. Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Кокора А.Н. Лазерная обработка материалов. М.: Машиностроение, 1975. 296 с.
15. Садовский В.Д. и др. Лазерный нагрев и структура стали: Атлас микроструктур. Свердловск: УрО АН СССР, 1989. 102 с.
16. Крапошин В.С. Обработка поверхности металлических материалов лазерным излучением // Поверхность, -№3. 1982. с. 1-11.
17. Коваленко В.С., Головки П.Ф., Меркулов Г.В., Стрижак А.И. Упрочнение деталей лучом лазера. -Киев: Техника, 1982. 130 с.
18. Реди Дж. Промышленное применение лазеров. -М.: Мир, 1978. 336 с.
19. Промышленное применение лазеров. Под ред. Г. Кёбнера. М.: Машиностроение, 1988. 244 с.
20. Металлография. Учебник для вузов. Лившиц Б.Г. М.:Металлургия, 1990. 236 с.
21. Flemings M.C. Solidification processing. -New York: McGraw-Hill Book company, 1974. 424 p.

22. Галенко П.К. Эффект диффузионной релаксации при высокоскоростной кристаллизации бинарного сплава // Кристаллография. - 1993. - т. 3. - № 6. - с. 238–243.
23. Кривилев М.Д., Галенко П.К. Программный комплекс для моделирования кристаллического структурного образования в переохлажденных бинарных сплавах: Учеб. пособие.-Ижевск: Издательский дом "Удмуртский университет 1999. 59 с.
24. Kurz W., Trivedi R. Rapid solidification processing and microstructure formation // Materials Science and Engineering, **A179/A180** (1994) 46-51.
25. Gremaud M., Carrard M., Kurz W. The microstructure of rapidly solidified Al-Fe alloys subjected to laser surface treatment // Acta metal. mater., **38**(12) (1990) 2587–2599.
26. Pierantoni M., Gremaud M., Magnin P., Stoll D., Kurz W. The coupled zone of rapidly solidified Al-Si alloys in laser treatment // Acta metal. mater., **40**(7) (1992) 1637–1644.
27. Gill S., Zimmerman M., Kurz W. Laser resolidification of the Al-Al₂Cu eutectic: the coupled zone // Acta metal. mater., **40**(11) (1992) 2895-2906.
28. Zimmerman M., Carrard M., Kurz W. Rapid solidification of Al-Cu eutectic alloy by laser remelting // Acta metal. mater., **37**(12) (1989) 3305-3313.
29. Carrard M., Gremaud M., Zimmerman M., Kurz W. About the banded structure in rapidly solidified dendritic and eutectic alloys // Acta metal. mater., **40**(5) (1992) 983–996.

30. Gremaud M., Carrard M., Kurz W. Banding phenomena in Al-Fe alloys subjected to laser surface treatment // *Acta metal. mater.*, **39**(7) (1990) 1431–1443.
31. Frenk A., Henchoz N., Kurz W. Laser cladding of a cobalt-base alloy: processing parameters and microstructure // *Zeitschrift für Metallkunde*, **84** (1993) 886–892.
32. Gill S., Kurz W. Laser rapid solidification of Al-Cu alloys: banding and plane front growth // *Materials Science and Engineering*, **A173** (1993) 335–338.
33. Zimmerman M., Karma A., Carrard M. Oscillatory lamellar microstructure in off-eutectic Al-Cu alloys // *Physical Review B*, **42**(1) 833–837.
34. Борисов В.Т., Духин А.И, Изучение пересыщенных твердых растворов и температурного режима при закалке из жидкого состояния. - В кн.: Рост и дефекты металлических кристаллов. Киев. Наукова думка, 1972, с. 408–414.
35. Чернов А.А. и др. Современная кристаллография/ Т. 3. Процессы кристаллизации.- М.: Наука, 1980. 408 с.
36. Boettinger W.J., Shechtman D., Schaefer R.J., Biancaniello F.S., The Effect of Rapid Solidification Velocity on the Microstructure of Ag-Cu Alloys // *Metallurgical Transactions A* **15** (1984) 55-66.
37. Gill S.C., Kurz W. Rapidly Solidified Al-Cu Alloys. I - Experimental Determination of the Microstructure Selection Map // *Acta Metallurgica and Materials*, **41**(12) 3563–3573.
38. Herlach D.M. Containerless undercooling and solidification of pure metals // *Annu. Rev. Mater. Sci.*, (1991) 23–44

39. Wei B., Herlach D.M., Feuerbacher B., Rapid crystal growth in undercooled alloy melts // *Microgravity Q.*, 3(2-4) (1993) 193–197.
40. Galenko P.K., Zhuravlev V.A., *Physics of Dendrites* (World Scientific, Singapore, 1994). 210 p.
41. Мирзаев Д.А., Коршунов Е.Е., Счастливцев В.М., Яковлева И.П. Влияние скорости охлаждения при закалке на количество остаточного аустенита и твердость углеродистых сталей // *ФММ*. 1983. Т 56. С. 1033–1035.
42. Яковлева И.Л., Счастливцев В.М., Табатчикова Т.И. Экспериментальное наблюдение бездиффузионного образования аустенита в стали с перлитной структурой при лазерном нагреве // *ФММ*. 1993. Т. 76. С. 86–98.
43. Садовский В. Д. Превращения при нагреве стали. Структурная наследственность. *Металловедение и термическая обработка стали: Справочник*. 1983. С. 83–109.
44. Макаров А.В. Повышение износостойкости сталей за счет применения различных способов скоростной закалки. Дис. канд. техн. наук. Свердловск, 1990.
45. Kurz W., Fisher D.J. *Fundamentals of Solidification*. Aedermannsdorf: Trans Tech Publication, 1992.
46. Lima M.S.F., H. Goldenstein and Morphological instability of the austenite growth front in a laser remelted iron-carbon-silicon alloy // *Journal of Crystal Growth* 208 (2000) 709–716.
47. Актуальные вопросы лазерной обработки сталей и сплавов / под ред. Б. К. Соколова и Н. Г. Терегулова. Уфа: "Технология 1994.

48. Садовский В.Д. и др. Фазовые и структурные превращения при лазерном нагреве стали. I. Влияние исходной структуры // ФММ. 1982. Т. 63. С. 88–94.
49. Макаров А.В. Коршунов Л.Г. Химич Г.Л. Влияние обработки непрерывным излучением лазера на износостойкость низкоуглеродистых сталей // Трение и износ. 1987. Т. 8. С. 293–301.
50. Химич Г.Л., Макаров А.В., Коршунов Л.Г., Осинцева А.Л. Износостойкость и структурные превращения стали 35, упрочненной излучением лазера // Машиноведение. 1986. N 3. С. 99–102.
51. Макаров А. В. и др. Влияние обработки непрерывным излучением лазера на износостойкость низкоуглеродистых сталей // Трение и износ. 1987. Т. 8. С. 293–301.
52. Коршунов Л.Г., Макаров А.В., Черненко Н.Л. Структурные аспекты износостойкости сталей мартенситного класса // ФММ. 1994 Т. 78. С. 128–146.
53. Коршунов и др. Влияние размера зерна и температуры отпуска на износостойкость стали 38ХНЗМФА // ФММ. 1986. Т. 61. С. 1007–1012.
54. Дуросов В.М. Разработка методов получения высококачественных слоев стальных деталей лазерной обработкой: Автореф. дис. ... канд. техн. наук.–Волгоград, 1999. с. 25.
55. Серебряков В.Г., Эстрин Э.И. Механические свойства двухфазных мартенсито–аустенитных никелевых сталей: Физические основы формирования физико–механических свойств сталей и сплавов / МЧМ СССР.– М.: Металлургия.–1990, с. 73–78.
56. Adam С.М., British Patent 2088409 (1980).

57. Hildeman G.J., U.S. Patent 4379719 (1983).
58. Galenko P., Sobolev S. Local nonequilibrium effect on undercooling in rapid solidification of alloys // *Phys. Rev. E.*, **55** (1997) 343–352.
59. Галенко П.К., Кривилев М.Д. Изотермический рост кристаллов в переохлажденных бинарных сплавах // *Математическое моделирование*, 2000, т.12, №11, с.17–37.
60. Галенко П.К., Кривилев М.Д., Ладьянов В.И., Осетров М.В. Применение модели локально неравновесного затвердевания к процессу кристаллического структурообразования при высокоскоростной закалке расплавов спиннингованием // *Кристаллография*. Т.46. №.2. (2001) С.354–355 (полный текст депонирован: Рукопись ВИНИТИ, No.827–V00. 1999
61. Galenko P.K., Krivilyov M.D. Modelling of crystal pattern formation in isothermal undercooled alloys // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **8**(1) (2000) 81–94.
62. Galenko P.K., Danilov D.A. // *Phys. Lett. A*, **235** (1997) 271.
63. Galenko P.K., Danilov D.A. // *Journal of Crystal Growth* **197** (1999) 992–1002.
64. Boettinger W.J., Coriell S.R. Solidification microstructures: recent developments, future directions // *Acta mater.* **48** (2000) 43–70.
65. Trivedi R., Kurz W. Morphological Stability of a Planar Interface under Rapid Solidification Condition, *Acta Metall.* **34** (1986) 1663–1670.
66. Pan Q.Y., Huang W.D. et al. Primary spacing selection of Cu-Mn alloy under laser rapid solidification condition, *J. Cryst. Growth* **181** (1997) 109–116.

67. Галенко П. К., Компьютерные модели дендритной кристаллизации, Кристаллизация и компьютерные модели: Труды V науч. техн. конф. Ижевск, 6—7 окт. 1992 г.
68. Найдич Ю.В., Перевертайло В.М., Григоренко Н.Ф. Капиллярные явления в процессах роста и плавления кристаллов. Киев: Наук. думка, 1983. 100 с.
69. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка, М.: Металлургия, 1987. 224 с.
70. Boiling G.F., Tiller W.A. Growth from the Melt. III. Dendritic Growth // J. Appl. Phys., **32**(12)(1961) 2587—2605.
71. Темкин Д. Е. Влияние сегрегации примеси на рост дендрита в переохлажденном расплаве // Кристаллография, Т. 32. Вып. 6. С. 1336—1346.
72. Lipton J., Kurz W., Trivedi R. Rapid Dendrite Growth in Undercooled Alloys // Acta Metall. **35** (1987) 957—964.
73. Boettinger W. J., Coriell S. R., Trivedi R. Application of Dendritic Growth Theory to the Interpretation of Rapid Solidification Microstructures // in Rapid Solidification Processing: Principles and Technologies IV. Eds. R. Mehrabian and P. A. Parrish. Claiborne's, Baton Rouge Louisiana, 1988. p. 13.
74. Langer J.S., Mueller-Krumbhaar H. Theory of dendritic growth. Elements of stability analysis // Acta Metall., **26** (1978) 1681.
75. Sobolev S. L. Effects of local nonequilibrium solute diffusion on rapid solidification of alloys // Phys. Stat. Sol. A, **156**(2) (1996) 293—303.

76. Deckard C.R., Beaman J.J. Recent advances in selective laser sintering // Proceedings of the 14th Conference on Production Research and Technology, Michigan, 1987. P. 447–451.
77. Abe F., Osakada K., Shiomi M., Uematsu K., Matsumoto M. // J. Mater. Process. Technol., **111** (2001) 210.
78. Lorrison J.C., Goodridge R.D., Dalgarno K.W., Wood D.J. Selective laser sintering of bioactive glass-ceramics // Proceedings of the Solid Freeform Fabrication Symposium. Austin: TX, 2002. P. 1–8.
79. Santos E., Abe F., Kitamura Y., Osakada K., Shiomi M. Mechanical properties of pure titanium models processed by selective laser melting, // Proceedings of the Solid Freeform Fabrication Symposium. Austin: TX, 2002. P. 180–186.
80. Kruth J.P. et al. Selective laser melting of iron-based powder // Journal of Materials Processing Technology, **149** (2004) 616–622.
81. Maeda K., Childs T.H.C. // Journal of Materials Processing Technology, **149** (2004) 609–615.
82. Shishkovsky I.V., Makarenko A.G., Petrov A.L. // Combust. Explo. Shock., **35** (1999) 166–170.
83. Shishkovsky I.V., et al. // J. Mater. Chem. **18** (2008) 1309–1317.
84. Glassa H.J., With G. // Mater. Charact. **47** (2001) 27–37.
85. Shishkovsky I., et al. Nanostructural self-organization under selective laser sintering of exothermic powder mixtures // Applied Surface Science. **255** (2009) 5565–5568.
86. Haranzhevskiy E.V. , Danilov D.A., Krivilyov M.D., Galenko P.K. Structure and mechanical properties of structural steel in laser

- resolidification processing // *Materials Science and Engineering A*, **375-377** (2004) 502–506.
87. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Физматгиз, 1977.
 88. Руководство пользователя Comsol MultiPhysics, версия 3.5a. Comsol Inc., 2009.
 89. Gill S. C., Kurz W. Rapidly solidified Al-Cu alloys-II. Calculation of the microstructure selection map // *Acta Metall. Mater.*, **43** (1995) 139–151.
 90. Norman A. F., Eckler K., Zambon A., Gärtner F., Moir S. A., Ramous E., Herlach D. M., Greer A. L. Application of microstructure-selection maps to droplet solidification: a case study of the Ni-Cu system // *Acta Mater.*, **46**(10) (1998) 3355–3370.
 91. Галенко П. К., Харанжевский Е. В., Данилов Д. А. Структура и механические свойства конструкционной стали при лазерной высокоскоростной перекристаллизации // *Физика металлов и металловедение*. 2002. Т. 94, №2. С. 207-216.
 92. Галенко П. К., Харанжевский Е. В., Данилов Д. А. Высокоскоростная кристаллизация конструкционной стали при лазерной обработке поверхностей // *Журн. техн. физики*. 2002. Т. 47, №5. С. 48-55.
 93. Haranzhevskiy E. V., Danilov D. A., Krivilyov M. D., Galenko P. K. Structure and mechanical properties of structural steel in laser resolidification processing // *Mater. Sci. Eng. A*, **375-377** (2004) 502–506.
 94. Gill S.C., Zimmermann M., Kurz W. Laser resolidification of the *Al – Al₂Cu* eutectic: The coupled zone // *Acta Metall. Mater.*, **40**(11) (1989) 2895–2906.

95. Kurz W., Giovanola B., Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification // *Acta. Metall.*, **34** (1986) 823–830.
96. Galenko P.K., Danilov D.A. Steady-state shapes of growing crystals in the field of local nonequilibrium diffusion // *Phys. Lett. A*, **272** (2000) 207–217.
97. Galenko P.K., Danilov D.A. Linear morphological stability analysis of the solid-liquid interface in rapid solidification of a binary system // *Physical Review E*, **69** (2004) 051608-1-14.
98. Galenko P. Extended thermodynamical analysis of a motion of the solid-liquid interface in a rapidly solidifying alloy // *Physical Review B*, **65** (2002) 144103-1-11.
99. Aziz M.J., Kaplan T. Continuous growth model for interface motion during alloy solidification // *Acta Metallurgica*, **36** (1988) 2335–2351.
100. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987. — 224 с.
101. Лыков А.В. Явления переноса в капиллярно-пористых телах. — М.: Гос. издательство технико-теоретической литературы, 1954.
102. P. Galenko. Solute trapping and diffusionless solidification in a binary system // *Phys. Rev. E*, **76** (2007) 031606-1-9.
103. Виноградов В.В., Тяжельникова И.Л. О теоретических аспектах формирования макро- и микроструктуры в затвердевающем металлическом слитке // *Вестник УдГУ. Сер. Физика. Химия.* — 2008. — Р. 37–57.
104. Galenko P.K., Danilov D.A. Local nonequilibrium effect on rapid dendritic growth in a binary alloy melt // *Phys. Lett. A*, **235** (1997) 271–280.

105. Bird R., Stewart W.E., Lightfoot E.N. Transport phenomena. — Wiley, 2002.
106. Prigogine I., Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes, Interscience, New York, 1961.
107. de Groot S.R. and Mazur P., Non-equilibrium Thermodynamics, North-Holland, Amsterdam, 1962.
108. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика: Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974.
109. Циглер С. Экстремальные принципы термодинамики необратимых процессов и механика сплошной среды. М.: Мир, 1966.
110. Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д. Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов, РХД, 2010. 496 с.
111. Журавлев В.А., Затвердевание и кристаллизация сплавов с гетеропереходами. РХД. 2006. 557 с.
112. Кривилев М.Д., Галенко П.К. Программный комплекс для моделирования кристаллического структурообразования в переохлажденных бинарных сплавах. Ижевск: Удмуртский университет, 1999. 58 с.
113. Galenko P., Jou D. Diffuse-interface model for rapid phase transformations in nonequilibrium systems // Phys. Rev. E, **17** (2005) 046125–1–13.
114. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика, Регулярная и хаотическая динамика (2007), 528 с.
115. Onsager L., Phys. Rev. **37**, 495 (1931); Prigogine I., Introduction to Thermodynamics of Irreversible Process (Interscience, New York, 1967).

116. Галенко П.К. К феноменологической теории локально-неравновесной кристаллизации сплавов. ДАН, т. 334, N. 6, с. 707–709.
117. Диаграммы состояния двойных металлических систем. — М.: Машиностроение, 1997. — V. 2.
118. Galenko P.K., Danilov D.A. Model for free dendritic alloy growth under interfacial and bulk phase nonequilibrium conditions // J. Crys. Growth, **197**(4) (1999) 992-1002.
119. Кривилёв М.Д., Харанжевский Е.В., Гордеев Г.А., Анкудинов В.Е., Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей // Управление большими системами, Выпуск 29. М.: ИПУ РАН, 2011.
120. Журавлев В.А. Затвердевание и кристаллизация с гетеропереходами. — РХД, 2006.